Universidade de Aveiro
2008/2009
Departamento de Química

Fabiana da Silva Moreira

Optimização da Separação de Compostos Orgânicos

Universidade de Aveiro Departamento de Química
Ano 2008/2009

Fabiana da Silva Moreira

Optimização da Separação de compostos Orgânicos

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química, realizada sob a orientação científica da Eng. Susana Pereira, assistente convidada do departamento de Química da Universidade de Aveiro e co-orientação de Doutor Francisco Avelino da Silva Freitas, Professor Auxiliar do Departamento de Química da Universidade de Aveiro

Dedico este trabalho à memória da minha mãe,
à minha família e aos meus amigos.

O júri

Presidente

Prof. Dr. José Joaquim Cruz Pinto
Professor catedrático do departamento de química da Universidade de Aveiro

Eng.ª Susana Estela Faustino Malaquias Pereira
Assistente convidada do departamento de química da Universidade de Aveiro

Prof. Dr. Francisco Avelino da Silva Freitas
Professor auxiliar do departamento de química da Universidade de Aveiro

Dr.ª Eng.ª Dulce Silva
Departamento de tecnologia, engenharia de projectos e desenvolvimento da CUF Químicos Industriais, S.A.

Agradecimentos

Aos meus orientadores, Engenheira Susana Pereira e Professor Doutor Avelino Silva por me terem proporcionado a realização deste trabalho e por toda a disponibilidade e interesse demonstrado.

À Catarina, ao João e à Sara pela sua disponibilidade e ajuda, principalmente na procura e realização da introdução deste trabalho.

A todos, familiares e amigos que me ajudaram e apoiaram, durante este ano e todos os outros que permaneci nesta academia

A todos os professores desta academia que me ajudaram, directamente ou indirectamente, ao longo de todo o meu percurso académico.

Palavras-chave Anilina, ciclohexanol, cicloxexilamina, destilação.

Resumo

Com este projecto prtende-se determinar a sequência ideal de separação, por destilação, de compostos orgânicos provenientes do efluente da produção de Anilina. Para tal, recorreu-se a um simulador de processos químicos, o *Aspen Plus*.

Numa primeira fase foi ainda desenvolvido um estudo de processos alternativos à separação destes compostos por destilação.

Depois de determinada a sequência de separação ideal foi desenvolvido o respectivo diagrama de Processo e Instrumentação, P&I, assim como efectuado o dimensionamento dos permutadores de calor associados.

Assumindo a possível comercialização de dois dos compostos deste efluente (o ciclohexanol e a ciclohexilamina) foi realizado um estudo de viabilidade economica, baseado nos indicadores mais comuns, o VAL e a TIR concluindo-se que a separação e posterior comercialização destes dois compostos é economicamente viável.

Keywords Aniline, cyclohexanol, cyclohexylamin, distillation.

Abstract

This project is aimed at finding the optimum separation sequence of several organic compounds found in an effluent generate an aniline production facility, using distillation, thus recovering several by-products with added commercial value such as Cyclohexylamine and Cyclohexanol. A brief study of different separation technologies as an alternative to distillation was also performed.

Determination of the optimum separation sequence is made by using a simulation software, *Aspen Plus*.

A Process and Instrumentation diagram, P&I, was then developed for the optimum cascade of distillation columns and the respective heat exchangers were designed.

Finally, a feasibility study, based on the most common economical indicators – Net Present Value, NPV and Internal Rate of Return, IRR is performed. These values indicate that the recovery and marketing of the above mentioned by-products is economically interesting thus reinforcing the interest in recovering such compounds as an alternative to its destruction.

Índice

Índice Tabelas

Índice Figuras

Introdução

Com este projecto pretende-se optimizar a separação de compostos orgânicos provenientes de um efluente da produção de Anilina. A mistura a separar tem como componentes anilina, benzeno, cicloxexilamina (CHA), ciclohexanol (CHOL) e água. As principais características e aplicações dos compostos em estudo, estão descritas no Capítulo 1. Para tal, é feita uma análise detalhada de três das cinco sequências, de separação que permitem a recuperação da ciclohexilamina e do ciclohexanol como produtos puros para posterior comercialização e valorização deste efluente.

Numa primeira fase são analisados diferentes processos de separação passíveis de ser utilizados, para a mistura em estudo. Para tal, serão analisados em mais detalhe processos de separação como a separação por membranas ou a extracção por solventes como alternativas ao processo de destilação. No Capítulo 2 apresentam-se assim as características típicas de cada um dos processos referidos acima e discutida a sua aplicabilidade como alternativa à destilação.

Numa segunda fase são definidas, com base nas propriedades físicas dos diferentes compostos, as possíveis sequências de separação destes componentes de forma a recuperar a anilina presente no efluente e a ciclohexilamina e o ciclohexanol como produtos puros. As sequências identificam-se por um determinado conjunto de colunas de destilação, que permite a separação da mistura em estudo. Estas sequências são descritas no Capítulo 3. No Capítulo 4 é feita a optimização da separação da mistura em estudo mediante a determinação da sequência ideal, ou seja, aquela à qual está associada o mínimo de uma função objectivo baseada em custos de operação e de investimento. A determinação dos custos associados a esta função objectivo é efectuada recorrendo a um simulador de processos químicos, o *Aspen Plus*.

Depois de determinada a sequência ideal para a separação em causa, é apresentado um estudo sobre o controlo da operação das diferentes colunas de destilação, Capítulo 5, e é desenvolvido o diagrama de Processos e Instrumentação, P&I, desta sequência.

No Capítulo 6 é realizado o dimensionamento dos permutadores de calor associados a cada coluna da sequência ideal, os condensadores e reebulidores.

Por fim é realizada a análise de viabilidade económica do projecto, Capítulo 7. Neste ponto do projecto são avaliados os custos de investimento, as vendas e os custos de

fabrico, como objectivo de determinar o Valor Actual Líquido (VAL) e a Taxa Interna de Rentabilidade (TIR) dois dos indicadores de viabilidade económica mais comummente utilizados em projectos industriais. Estes indicadores permitem avaliar a viabilidade económica do projecto realizado.

Capítulo 1 - Componentes da mistura

1.1 Anilina

É também conhecida por aminobenzeno, é um composto orgânico, liquido e incolor, dissolve-se na maioria dos solventes orgânicos e relativamente solúvel na água.

As principais propriedades físicas e químicas da anilina encontram-se na Tabela 1.1. Na Tabela I.1 do Anexo I, encontram-se outras propriedades deste composto.

Tabela 1.1: Propriedades da anilina[26].

Anilina	
Fórmula química	C_6H_7N
Peso molecular (g/mol)	93,126
Ponto de ebulição (ºC)	184,13

Neste projecto, assume-se que a anilina é produzida a partir da hidrogenação do nitrobenzeno, na fase líquida. A anilina é utilizada principalmente na produção de MDI, herbicidas, pesticidas, tintas e pigmentos, fibras especiais e na indústria da borracha. [1]

1.2 Ciclohexanol

É um álcool cíclico alifático saturado, é um líquido higroscópico, oleoso e límpido.

O ciclohexanol é produzido a partir da hidrogenação do fenol ou da oxidação do ciclohexano, em fase líquida. O ciclohexanol é utilizado principalmente na produção de ácido adípico e do nylon 66P. Também é utilizado como solvente, material de lavagem a seco, no fabrico de sabões e detergentes e como intermediário na produção de fármacos, plásticos, químicos de borracha, ciclohexilamina e pesticidas. [2]

As principais propriedades físicas e químicas do ciclohexanol encontram-se na Tabela 1.2. Na Tabela I.1 do Anexo I, encontram-se outras propriedades deste composto.

Tabela 1.2: Propriedades do ciclohexanol[27].

Ciclohexanol	
Fórmula química	$C_6H_{11}OH$
Peso molecular (g/mol)	100,16
Ponto de ebulição (ºC)	161ºC

1.3 Cicloxexilamina

É um derivado do ciclohexano, é um líquido amarelado.

A cicloxexilamina é produzida a partir da hidrogenação da anilina, durante a sua produção. A cicloxexilamina é utilizada principalmente na indústria da borracha, no fabrico de adoçantes e no tratamento de águas de caldeiras. [1]

As principais propriedades físicas e químicas da ciclohexilamina encontram-se na Tabela 1.3. Na Tabela I.1 do Anexo I, encontram-se outras propriedades deste composto.

Tabela 1.3: Propriedades da ciclohexilamina[27].

Ciclohexilamina	
Fórmula química	$C_6H_{11}NH_2$
Peso molecular (g/mol)	99,18
Ponto de ebulição (ºC)	134,5

Capítulo 2 – Processos de Separação

Neste capítulo pretende-se efectuar o levantamento e análise de alguns processos de separação, que possam ser utilizados para a separação da mistura em estudo. Esta análise permitirá seleccionar o ou os processos apropriados para a separação desta mistura.

De entre os possíveis processos industriais de separação de compostos orgânicos destacam-se processos como a extracção por solventes, processos de separação por membranas e a destilação. Dado que a mistura é constituída por apenas uma fase, ou seja, os diferentes componentes não são imiscíveis, processos como a separação líquido-líquido não serão aqui abordados.

2.1 Processos de Separação por Membranas

A separação por membranas consiste na aplicação de uma determinada força motriz a uma mistura de forma a que o solvente atravesse a membrana, originando o permeado, ou, o solvente puro e um concentrado (ou retentado) com elevada concentração do soluto. A força motriz aplicada define o tipo de processo variando entre diferenças de potencial, pressão ou campo eléctrico. As desvantagens da aplicação das técnicas de separação de membranas são o facto de existir uma fracção de efluente que não é tratado (o concentrado), a necessidade do tratamento do concentrado, a degradação das membranas e elevados custos de investimento e manutenção.[12]

Neste projecto foram analisadas mais em detalhe a Osmose Inversa e a Pervaporação.

2.1.1 Osmose Inversa

A osmose inversa é caracterizada pela passagem de um solvente através de uma membrana densa que é permeável ao solvente e não ao soluto. Na Figura 2.1, está ilustrado o processo de osmose. Inicialmente, Figura 2.1.a, a água do mar, com cerca de 3,5wt% de sais dissolvidos, encontra-se à pressão atmosférica, 101,3 KPa e do lado esquerdo da membrana. Do lado direito da membrana, encontra-se a água pura à mesma pressão. A membrana densa é permeável à água mas não aos sais, ou seja, por osmose a água passa do

lado direito para o lado esquerdo onde se encontra a água do mar. O facto de água se mover para o lado esquerdo vai permitir a diluição dos sais presentes na solução até ser atingido o chamado equilíbrio osmótico. No equilíbrio, Figura 2.1.b, alguma água pura ainda reside no lado direito, e a água do mar encontra-se do lado esquerdo mas agora menos concentrada em sais. A pressão do lado esquerdo, P1, é agora maior que a pressão no lado direito, P2, e entre ambas existe uma diferença de pressão, π, denominada pressão osmótica. Como se pode concluir o processo de osmose não é um método de separação usual, o solvente é transferido na direcção oposta, e o resultado é uma mistura e não uma separação. No entanto pode existir um retorno do solvente através da membrana, Figura 2.1.c, aplicando uma pressão no lado esquerdo, P1. Esta pressão terá de ser maior que a soma da pressão osmótica e a pressão do lado direito, P2. Este fenómeno é denominado osmose inversa, e, pode ser utilizado para remover o solvente de uma mistura soluto solvente.

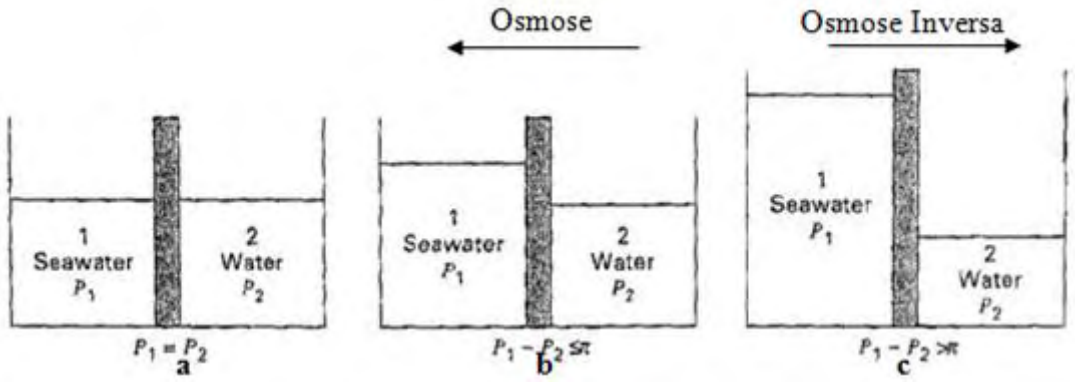

Figura 2.1: Ilustração do processo de osmose.[13]

Quando se selecciona uma membrana tem de se ter em conta a permeabilidade e a selectividade da membrana ao solvente. Em osmose inversa ainda é necessário ter em conta a espessura da membrana dado que estas terão de resistir às elevadas pressões que geralmente estão sujeitas num processo deste tipo. Quando são utilizadas membranas assimétricas ou de paredes finas, é necessário considerar igualmente um suporte poroso e denso.

Os produtos da osmose inversa são os permeados, que na sua maioria são solventes puros, e o retentato que é a alimentação empobrecida em solvente, conforme representado na Figura 2.2. No entanto não é possível, ainda, conseguir uma separação perfeita entre o

solvente e o soluto, pois apenas uma fracção do solvente presente na alimentação é transferido para o permeado.

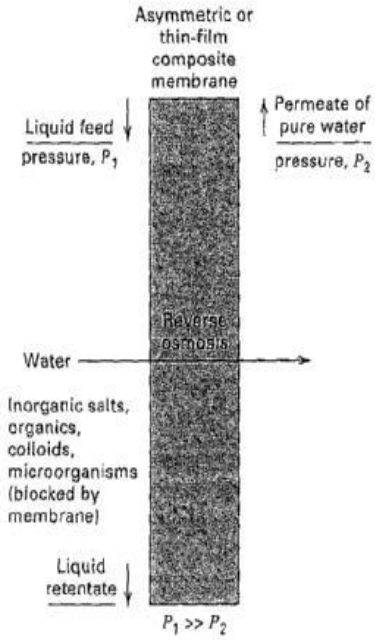

Figura 2.2: Osmose inversa.[13]

A osmose inversa é um processo tecnologicamente bem estabelecido para o tratamento de águas. De facto, as aplicações mais importantes da osmose inversa são a dessalinização e a purificação da água do mar, água salobra e águas residuais. A osmose inversa tem, contudo, outras aplicações[14]:

- Tratamento da água residual industrial para remoção de iões metálicos pesados, substancias não biodegradáveis e outros componentes de valor comercial;
- A separação de sulfitos e bissulfitos dos efluentes no processo de pasta e papel;
- Tratamento de água residual no processo de tingimento;
- Na recuperação de constituintes com valor alimentar a partir de águas residuais em fábricas alimentares;
- O tratamento de águas municipais para remoção de sais inorgânicos, compostos orgânicos de baixo peso molecular, vírus e bactérias;
- A desidratação de certos produtos alimentares como por exemplo o café, as sopas, o chá, o leite e o sumo de laranja.

Estas aplicações são utilizadas em menor escala, e para serem possíveis as membranas têm de ser estáveis a nível químico, mecânico e térmico, para poderem competir com outros processos de separação.

As membranas poliméricas, são as membranas mais utilizadas em osmose inversa. No entanto estas têm alguns problemas associados, sendo os principais aqueles relacionados com o seu entupimento excessivo (o que obriga a uma pré-filtração da alimentação) e a baixa resistência a cloro e outros oxidantes.

Nos últimos anos têm surgido membranas cerâmicas cuja resistência mecânica permite ultrapassar grande parte das desvantagens mencionadas acima. Contudo, o seu elevado custo e a baixa selectividade limitam ainda a sua aplicação à maior parte das aplicações industriais da osmose reversa[14].

Em suma, a osmose inversa é um processo de separação, que recorre à utilização de membranas selectivas e uma elevada pressão trans-membranar. Este processo pode ser usado para separação de compostos orgânicos ou de misturas aquosas-orgânicas. Com efeito, com o objectivo de obter a taxa de recuperação dos componentes com valor comercial especificados no projecto (CHA e CHOL) especificados no projecto, a pressão osmótica da mistura resultante como retentado poderá inviabilizar a utilização de membranas.

Esta tecnologia poderá, contudo, conduzir a uma menor complexidade das diferentes sequência de colunas de destilação identificadas nos capítulos seguintes, caso estejam disponíveis no mercado membranas selectivas e quimicamente resistentes à mistura em estudo e que permitam uma desidratação prévia do efluente.

Conclui-se assim que esta tecnologia, por si só, apresenta fortes limitações como alternativa ao processo de destilação. Contudo, em combinação com a destilação poderá gerar um processo menos complexo para a recuperação dos compostos mencionados acima. Assim, é aconselhado um estudo mais aprofundado das propriedades osmóticas do efluente bruto e uma pesquisa no mercado de membranas permeáveis e selectivas aos compostos em questão com o objectivo de se conseguir uma desidratação prévia deste efluente.

2.1.2 Pervaporação

A pervaporação é caracterizada pela imposição de uma barreira (membrana) entre uma fase líquida e uma gasosa, através da qual se dá a transferência de massa, selectivamente, para o lado gasoso. Denomina-se pervaporação ao fenómeno exclusivo da exigência de mudança de fase dos solutos, à medida que se difundem pela membrana.[3]

A pervaporação, de uma forma simples, é a combinação energeticamente eficiente de permeação através de membranas e evaporação. É considerada uma boa alternativa a outros processos de separação, em situações como[4]:

- "Quebra" de azeótropos, desidratação de solventes e outros compostos orgânicos voláteis, compostos orgânicos tais como remoção etanol/ metanol e purificação de águas residuais;
- Desidratação de solventes orgânicos e na remoção de compostos orgânicos de correntes aquosas;
- Separação de produtos sensíveis ao calor.

A grande diferença entre a pervaporação e outros processos de separação por membranas é o facto da mistura, que se pretende separar, se encontrar em dois estados físicos diferentes, um de cada lado da membrana. A alimentação ao módulo da membrana é uma mistura com pressão suficiente para a manter no estado líquido, sendo o outro lado da membrana mantido a uma pressão inferior ao ponto de condensação, mantendo o permeado no estado de vapor (normalmente com vácuo), Figura 2.3. A temperatura está restringida aos 100ºC e, como em outros processos de membranas, é necessário um pré-tratamento da alimentação e limpeza da membrana.[4]

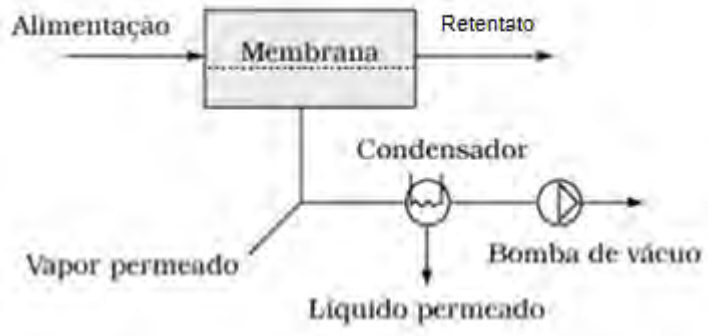

Figura 2.3: Processo de pervaporação por vácuo.[16]

A pervaporação em contínuo consome pouca energia, opera melhor com baixo teor de impurezas na alimentação e adapta-se bem a grandes capacidades. Torna-se preferível a permeação na fase gasosa quando se tem correntes directas de colunas de destilação ou com sólidos dissolvidos.

A Figura 2.4, mostra um sistema típico de pervaporação. A alimentação flui ao longo de um dos lados da membrana, enquanto uma fracção da alimentação passa através da membrana (permeado) e sai na forma de vapor sob o efeito de vácuo ou com a alimentação de um gás inerte que assume também a função de transporte. O permeado é finalmente recolhido no estado líquido após condensação. O produto líquido fica mais rico no composto da alimentação e com mais facilidade se faz permear pela membrana.

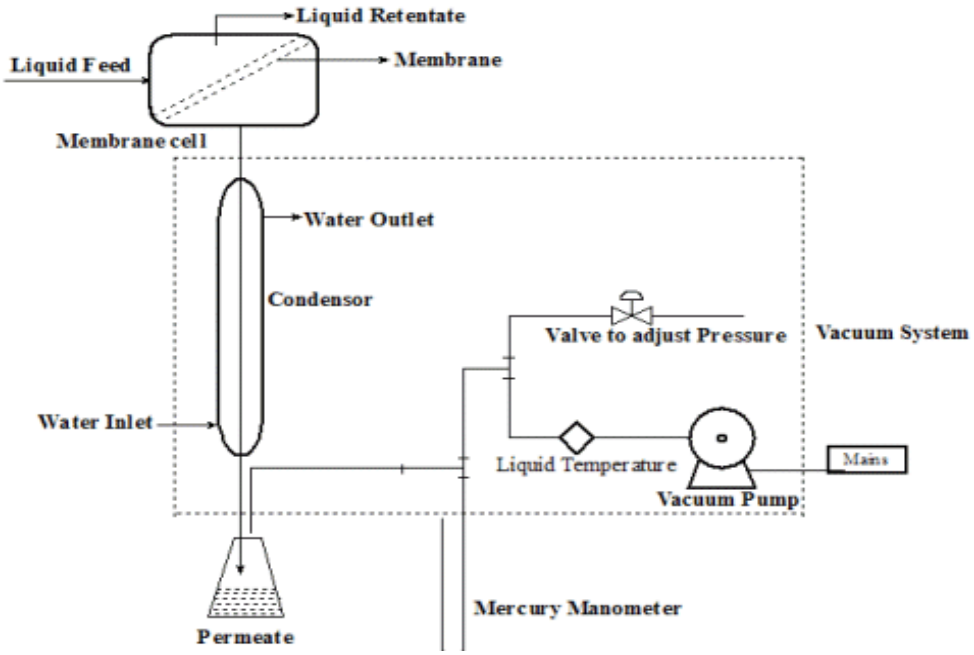

Figura 2.4: Pervaporação simplificada.[17]

As membranas utilizadas em pervaporação são caracterizadas de acordo com a sua função. As membranas de separação líquido-líquido necessitam de limpeza regular, normalmente diária, e são facilmente danificadas por químicos, componentes agressivos, acção mecânica, temperaturas excessivas e durante ciclos de limpeza. Os princípios do uso da pervaporação na remoção de água de um solvente envolvem a utilização de uma membrana que rejeita a água.[5]

Tendo em conta as propriedades da mistura em estudo conclui-se que devido aos elevados pontos de ebulição dos seus compostos, a pervaporação não será uma alternativa, por si só, à recuperação dos diferentes componentes por destilação. Contudo, e à semelhança da osmose reversa, esta poderá ser utilizada em conjunto com a destilação com o objectivo de simplificar o processo global de separação da mistura - quer pela possível desidratação prévia do efluente bruto quer como alternativa às colunas de destilação das diferentes sequência identificadas nos capítulos seguintes onde é realizada a separação da água (e benzeno). Neste caso, terá uma vantagem adicional relacionada com a possibilidade de substituir a utilidade quente da coluna de destilação (vapor de alta pressão) por vapor de baixa pressão, com uma redução nos custos globais de operação.

Conclui-se assim que esta tecnologia, por si só, apresenta fortes limitações como alternativa ao processo de destilação. Contudo, em combinação com a destilação poderá gerar um processo menos complexo para separação da mistura em estudo. Assim, e à semelhança do que foi referido para a osmose reversa, é aconselhado um estudo mais aprofundado da aplicabilidade das membranas de pervaporação existentes no mercado como alternativa à separação de água por destilação.

2.2 Extracção por solventes

A extracção por solventes utiliza como princípio de operação a diferença de solubilidade dos diversos componentes de uma mistura em determinados solventes. Por exemplo, a água apresenta grandes diferenças de solubilidade em várias classes de solventes. Os hidrocarbonetos ou hidrocarbonetos clorados são muito hidrofóbicos e podem, assim, ser utilizados em processos de extracção líquido/líquido (ELL).[5]

Quando se pretende realizar a remoção de água de um solvente totalmente miscível em água, torna-se útil saber a atracção relativa entre a água e o solvente. Esta relação pode ser determinada considerando o coeficiente de actividade do solvente numa diluição infinita em água (γ^{∞}). Os solventes que são parcialmente miscíveis em água apresentam, normalmente, valores altos de γ^{∞}, os solventes totalmente miscíveis em água apresentam, normalmente, valores baixos de γ^{∞}. Em suma seria mais fácil utilizar um solvente com baixa misciblidade em água combinado com afinidade para o solvente dissolvido, de forma a extrair o solvente da água quando o seu valor de γ^{∞} é alto. Pela mesma razão, é

economicamente inviável, por exemplo, o uso de um solvente extractor para extrair metanol da água.[5]

A grande desvantagem da ELL é a saturação da fase aquosa por parte do solvente orgânico introduzido no sistema. Dependendo da sua perigosidade, a sua descarga como efluente pode ser inviável sendo necessário incineração ou outro pós-tratamento.[5]

Do processo de extracção resultam duas correntes: o extracto e o refinado. O extracto é a corrente de solvente rica no produtos extraídos e o refinado é a corrente residual empobrecida nos compostos extraídos.[5]

A selecção do solvente adequado deve cumprir determinados critérios sendo os mais importantes, a) deverá ter uma baixa solubilidade na mistura a separar, b) deverá ser fácil de separar do componente extraído, c) deve ser quimicamente estável e d) deve permitir uma diferença de densidade suficiente para garantir uma boa separação de fases.[5]

Dado que neste processo é adicionado um novo composto, a ELL é um processo mais complexo do que a destilação uma vez que é necessário um ou mais passos adicionais para recuperar o solvente utilizado, não só por razões económicas mas por questões ambientais, especialmente se este for considerado perigoso. Conclui-se assim que esta técnica apenas é utilizada como alternativa à destilação quando esta não é economicamente ou tecnicamente possível – por exemplo quando pode ocorrer a decomposição térmica de algum dos componentes da mistura ou pela formação de azeótropos. Para a mistura em estudo é de esperar ainda uma desvantagem adicional relacionada com o facto dos compostos que se pretendem recuperar terem propriedades físicas e químicas muito semelhantes, indiciando que a selecção de um solvente adequado poderá ser difícil.

2.3 Destilação

A destilação é um processo de separação bastante antigo, e de acordo com a opinião de alguns autores, foi inventado pelo francês Cellier-Blumenthal e usado pela primeira vez no Egipto.[6] A destilação, desde a idade média, é utilizada na produção de bebidas alcoólicas, o que influenciou determinantemente o desenvolvimento do equipamento utilizado.[7]

Nos séculos XIX e XX, a arte da destilação desenvolveu-se rapidamente, devido às industrias petroquímica, de óleo, química e farmacêutica, por isso hoje em dia, a destilação

é utilizada para muito mais do que apenas bebidas alcoólicas, sendo também aplicada nestas industrias e em outras relacionadas.[6]

A destilação, de uma forma simples, é um processo no qual ocorre a separação de uma mistura, com dois ou mais componentes, líquida ou gasosa, através do fornecimento e/ou remoção de calor. A separação dos componentes varia com a facilidade de evaporação e a pureza desejada de cada um.

A destilação clássica pode ser classificada a partir do modo de operação considerado, ou seja, pode ser classificada como destilação contínua ou descontínua. Em destilação contínua as colunas processam correntes de alimentação contínuas, ou seja, não ocorre qualquer interrupção durante o processo de destilação, desde que não surja nenhum problema com a coluna ou com as unidades de processo circundantes. As colunas em contínuo permitem elevadas produções, sendo as mais comuns. Em destilação descontínua a alimentação às colunas e feita de forma descontínua, ou seja, a coluna é carregada com a alimentação pretendida e seguidamente inicia-se a destilação, assim que o objectivo pretendido for atingido, é carregada novamente a alimentação pretendida. A destilação ainda pode ser classificada segundo:

- Natureza da alimentação: binária ou multicomponente;
- Tipo de equipamento: pratos ou enchimento;
- Configuração do processo: azeotrópica, extractiva ou complexa;
- Tipo de processo: refinação, petroquímica, química ou tratamento de gases.

No entanto a destilação é um processo complexo tanto na prática (equipamento) como em teoria. Aplicar unidades de destilação com sucesso, exige combinar na perfeição o conhecimento teórico dos fundamentos do processo com o conhecimento do equipamento.[7]

2.3.1 Constituintes de uma coluna de destilação

Os constituintes de uma coluna de destilação, são vários, e cada um deles é utilizado quer para transferir energia ou calor, quer para melhorar a transferência de massa. Os constituintes principais de uma coluna de destilação são:

- “Carcaça” vertical onde ocorre a separação de componentes líquidos;

- Partos e/ou enchimento, que permitem um melhor separação dos componentes da mistura;
- Reebulidor para promover a vaporização necessária ao processo de destilação;
- Condensador para arrefecer e condensar o vapor que sai no topo da coluna;
- Tambor de refluxo para reter o vapor condensado no topo da coluna, de forma que o líquido possa ser reciclado de volta à coluna.

A carcaça vertical protege o conteúdo interno da coluna de destilação. Na Figura 2.5 está representado um esquema de uma unidade de destilação típica, com uma única alimentação e duas correntes de produto.[8]

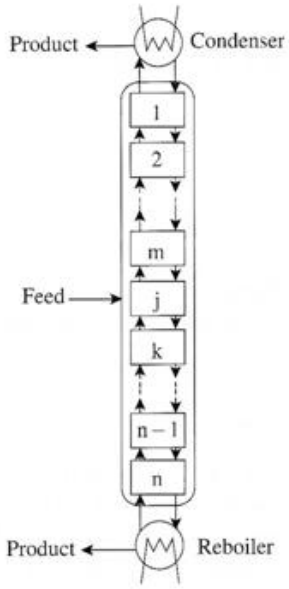

Figura 2.5: Esquema de uma unidade típica de destilação.[4]

Para uma melhor compreensão do funcionamento da coluna de destilação será feita uma breve abordagem a alguns dos seus constituintes.

2.3.1.1 Internos

Os internos de uma coluna de destilação podem ser do tipo pratos ou enchimento.

No que diz respeito aos pratos, existem vários modelos no mercado, no entanto os mais comuns são os “bubble cap”, “valve” e “sieve”. O que varia entre estes tipos de pratos é a sua geometria.[4]

Os pratos “sieve” e “valve” têm substituído os “bubble cap”, em muitas aplicações, devido à sua eficiência, larga escala de operação, fácil manutenção e aos factores de custo.[8] O prato mais utilizado é o “sieve”, Figura 2.6, no entanto este tipo de prato tem uma desvantagem, dado que existe uma porção significativa da área, no interior da coluna, que não está disponível par o contacto líquido-vapor, devido ao arranjo do “downcomer”. Para evitar este problema foram desenvolvidos pratos de elevada capacidade, ou seja, com maior área activa, Figura 2.6.b.

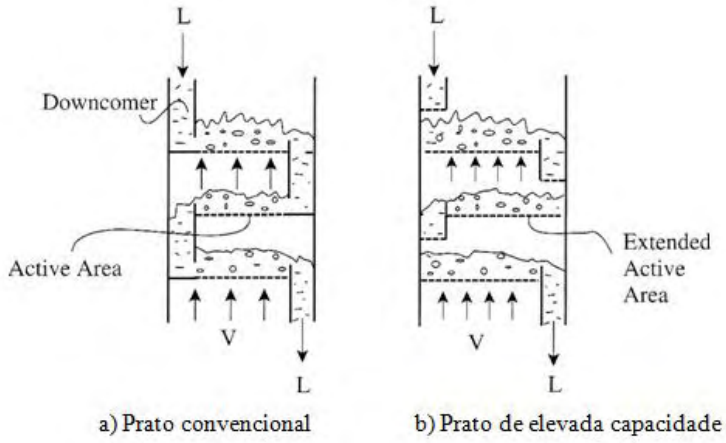

Figura 2.6: Representação ilustrativa de um prato “sieve”, de uma coluna de destilação.[4]

Numa coluna de destilação, o número de pratos ou andares, é sempre superior ao número de estágios de equilíbrio, pois as limitações à transferência de massa e a pobre eficiência de contacto não permitem atingir o equilíbrio LV em um só prato.[4]

Por outro lado tem-se vindo a notar uma tendência crescente para a substituição dos pratos por enchimento. Os enchimentos são instrumentos passivos projectados para melhorar o contacto líquido-vapor, pois aumentam a área interfacial disponível. Em suma, a utilização de um conjunto de peças, do mesmo tipo, proporciona um bom contacto líquido-vapor, sem baixar a pressão excessiva através da secção empacotada. Este facto é importante, pois uma elevada queda de pressão implicaria um gasto maior em energia na condução de calor no sentido ascendente na coluna de destilação.[8]

As colunas com enchimento são chamadas colunas de contacto continuo, enquanto que as colunas de pratos são chamadas colunas de contacto por estágios, devido à forma como o vapor e o líquido se contactam.[8] Com base nesta característica, a utilização de

determinadas colunas irá depender das especificações e condições de operação e equipamento pretendidas.

Podemos então dizer que os pratos devem ser utilizados quando:

- A corrente de líquido é mais elevada do que a de vapor (separação difícil);
- O diâmetro da coluna é grande;
- Há uma variação na composição de alimentação;
- A coluna requer alimentações múltiplas ou produtos múltiplos.[4]

Por outro lado, os enchimentos devem ser utilizados quando:

- O diâmetro da coluna é pequeno;
- São utilizadas condições de vácuo;
- É necessário baixar a queda de pressão;
- O sistema é corrosivo;
- O sistema tem tendência a formar espuma;
- É requerida uma baixa retenção de líquido na coluna.[4]

2.3.1.2 Condensadores

Os condensadores permitem a condensação da corrente que sai pelo topo, corrente de vapor, transformando-a numa corrente líquida, produto de topo. Existem dois grandes tipos de condensadores, os parciais e os totais, sendo os últimos os mais utilizados em projectos de colunas de destilação. Os condensadores totais devem ser utilizados quando o produto de topo é alimentado a outra coluna de destilação, com uma pressão mais elevada, pois a pressão do líquido pode ser facilmente aumentada mediante a introdução de bombas. Teoricamente, o condensador parcial actua como um estágio adicional, no entanto a performance tende a ser inferior à de um prato teórico.[4]

2.3.1.3 Reebulidores

Os reebulidores podem ser vistos como permutadores de calor utilizados para transferir energia, suficiente, para levar o líquido da cauda da coluna até o ponto de ebulição. Existem reebulidores totais ou parciais. A escolha do tipo de reebulidor mais

adequado depende da natureza do fluído a processar, da sensibilidade dos produtos da base à degradação térmica, da pressão de operação, da diferença de temperatura entre o processo e a média de aquecimento e do "layout" do equipamento.[1]

2.3.2 Operação básica e terminologia

A mistura a separar é denominada alimentação. A alimentação é introduzida na coluna no andar de alimentação. A coluna tem ainda mais duas secções que são o topo e a cauda. O topo refere-se a parte superior da coluna onde é removida a corrente de vapor, produto de topo, e a cauda é a parte inferior da coluna onde é removida a corrente líquida, produto de cauda.

É fornecido calor ao reebulidor, para gerar o vapor necessário à operação da coluna. A fonte de calor mais utilizada em indústrias químicas é o vapor de água. O vapor produzido no reebulidor é reintroduzido na unidade pela cauda da coluna.

O vapor move-se na coluna no sentido ascendente, saindo pelo topo da coluna onde é arrefecido pelo condensador. O produto condensado, líquido, é armazenado num recipiente conhecido por tambor de refluxo ("reflux drum"), e algum produto é reciclado, o chamado refluxo, ou seja é reintroduzido na coluna.

2.3.3 Equilíbrio líquido-vapor

A separação de uma mistura fluida homogénea requer a criação de outra fase ou a adição de um agente de separação de massa. A fase de vapor será rica em compostos mais voláteis, e a fase líquida será rica em componentes menos voláteis. No entanto todos os componentes podem aparecer em ambas as fases.

Se o sistema permitir atingir condições de equilíbrio, então a distribuição componentes entre fases é determinada por considerações de equilíbrio líquido-vapor.[4] A lei de Raoult, Equação 1, é a lei que melhor descreve o equilíbrio líquido-vapor, no caso de uma mistura ideal.

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \qquad \text{Eq. 2.1}$$

Alterando a equação obtêm-se uma equação aplicável a uma mistura real, introduzindo o conceito de fugacidade (ϕ_i) e do coeficiente de actividade (γ_i). Na mistura em estudo, apenas a fase líquida é não ideal, então apenas se introduz o conceito de coeficiente de actividade, Equação 2.2, na Equação 2.1.

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \qquad \text{Eq. 2.2}$$

Existem vários modelos que permitem estimar o coeficiente de actividade, tais como o modelo de Margules, Van Laar, Flory-Huggins, UNIQUAC e UNIFAC. O modelo utilizado, neste caso, foi o UNIFAC.

O modelo UNIFAC (Universal Functional-group Activity Coefficient) é considerado o modelo de actividade preditivo mais popular. Este modelo representa o coeficiente de actividade como a soma de uma parte combinatória e uma residual, Equação 2.3.

$$\ln(\gamma_k) = \ln(\gamma_k^{COMB}) + \ln(\gamma_k^{RES}) \qquad \text{Eq. 2.3}$$

Este modelo considera as energias de interacção, entre os grupos funcionais, e não da molécula como um todo, para determinar o tempo residual. As interacções dos grupos são adicionadas para prever as energias de interacção relativa das moléculas.

$$\ln(\gamma_k^{COMB}) = \ln\left(\frac{\phi_k}{x_k}\right) + \left(1 - \frac{\phi_k}{x_k}\right) - 5q_k\left[\ln\left(\frac{\phi_k}{\theta_k}\right) + \left(1 - \frac{\phi_k}{\theta_k}\right)\right] \qquad \text{Eq. 2.4}$$

O grande número de grupos funcionais, possíveis, divide-se em grupos principais, que por sua vez se dividem em subgrupos, alguns exemplos foram colocados no anexo II, na Tabela II.1. Os subgrupos tem tamanhos e áreas superficiais específicas diferentes, no entanto as interacções energéticas são consideradas iguais para todos os subgrupos. No anexo II, Tabela II.2, estão alguns valores para as interacções. No anexo II ainda é possível obter uma explicação mais detalhada do método UNIFAC.

2.3.4 Condições de operação

As condições da alimentação, caudal e composição, normalmente são conhecidas, assim como a especificação do produto pretendido. O produto desejado pode ser expresso em termos de pureza e/ou recuperação. Contudo há algumas condições de operação que devem ser determinadas pelo projectista. Este tem de determinar qual a pressão de operação, a razão de refluxo e o tipo de condensador.

A pressão de operação deve ser a primeira decisão que o projectista deve tomar. O projectista escolhe a pressão de operação com base nos seguintes factores:

- Número de estágios e quantidade de refluxo;
- Capacidade do condensador e do reebulidor;
- Temperatura do condensador.

Deve ser estabelecida a pressão de operação mais baixa possível (se possível perto da pressão atmosférica) que permita o arrefecimento do condensador com água ou ar e não fluidos térmicos como óleos ou amoníaco. Deve ainda evitar-se a utilização de vácuo - ambos induzem aumentos nos custos de operação e na complexidade do design da coluna, devendo ser evitados sempre que possível.

Existem duas grandes excepções a estas orientações - quando se pretende separar gases e hidrocarbonetos leves, a pressão de operação da coluna pode tornar-se excessiva, sendo preferível a utilização de fluidos térmicos. No caso de se efectuar a destilação de compostos cuja temperatura de ebulição é superior à sua temperatura de decomposição deverá ser seleccionada uma operação sob vácuo.

Outra condição de operação que necessita ser escolhida é a razão de refluxo. À medida que esta variável aumenta, a partir do seu mínimo, os custos de capital diminuem inicialmente, pois o número de pratos diminui, a partir do infinito. No entanto os custos de utilidades aumentam à medida que é necessário maior vaporização e condensação.

O projectista ainda tem que optar qual o tipo de condensador a utilizar. Quando a mistura a destilar tem componentes com pontos de ebulição baixos, estes requerem refrigeração a temperaturas muito baixas, aumentando os custos de operação para um condensador total, sendo mais económico utilizar um condensador parcial.

Em suma, alguns estudos consideram que o processo de destilação está longe de estar totalmente consolidado, havendo muito por onde melhorar a sua aplicação e operação. Existe um grande potencial para o investimento económico e poupanças energéticas usando a destilação “clássica” e ao mesmo tempo oportunidades de combinar o nosso entendimento dos princípios de destilação com outras áreas de separação.[6]

Capítulo 3 – Definição das Sequências de Separação Possíveis

Neste capítulo são apresentados os dados do problema em estudo, e as possíveis sequências de separação dos vários componentes da mistura em estudo. As sequências possíveis são determinadas com base nas propriedades físicas dos componentes da mistura. O estudo detalhado das várias sequências permite obter uma solução óptima para a separação da mistura em estudo.

3.1 Dados do Problema

Na tabela 3.1 está apresentada a composição da corrente de entrada da primeira coluna. O caudal de entrada, da primeira coluna, é de 500 kg/h. A composição da corrente de entrada e o caudal de entrada são iguais nas três sequências.

Tabela 3.1: Valores da composição da corrente de alimentação.

Alimentação	
Benzeno, BNZ (% w/w)	25
Água, H_2O (% w/w)	4
Cicloxexilamina, CHA (% w/w)	8
Ciclohexanol, CHOL (% w/w)	5
Anilina, ANL (% w/w)	58

A recuperação mínima do benzeno presente na alimentação é de 99%. A recuperação mínima da anilina presente na alimentação é de 95%. A recuperação de CHA presente na alimentação é de 90%. A recuperação mínima do CHOL presente na alimentação é de 90%.

Pretende-se ainda que o CHOL tenha menos que 0,4% de impurezas, em base seca, e 0,3% de água e o CHA tenha menos que 1% de impurezas, em base seca, e 0,3% de água.

3.2 Sequências de Separação

As sequências possíveis obtêm-se através do conhecimento das propriedades físicas dos compostos, e com a ajuda de regras heurísticas é possível determinar as sequências mais apropriadas à separação. As propriedades dos componentes da mistura em estudo estão apresentadas na Tabela I.1, no anexo I.

Na sequência 1, Figura 3.1, pretende-se recuperar, na primeira coluna, a anilina presente na mistura, como resíduo. Na segunda coluna pretende-se eliminar o benzeno e a água como destilado. Por fim, na terceira coluna é feita a separação os dois produtos pretendidos, o CHA e o CHOL. O objectivo principal, na coluna 1 desta sequência, é a remoção suficiente da mistura inicial da anilina para garantir a pureza do CHOL na coluna 3 e, garantir a remoção da água e do benzeno pelo topo da coluna 2 de forma a garantir a pureza do CHA na coluna 3.

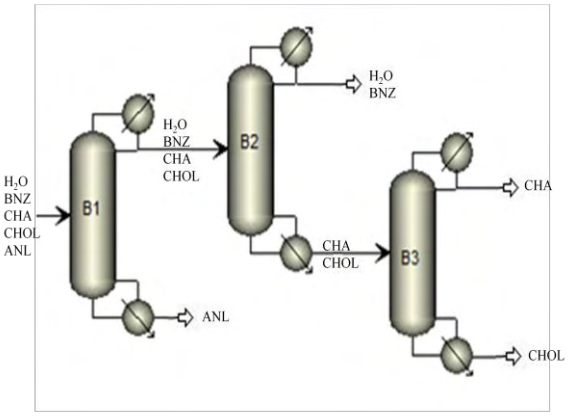

Figura 3.1: Representação esquemática da sequência 1.

Na sequência 2, Figura 3.2, na primeira coluna realiza-se a separação da anilina do resto da mistura. A anilina é retirada como resíduo. Na segunda coluna realiza-se a separação do CHOL dos restantes compostos (benzeno, água e CHA), o CHOL, produto desejado, e recuperado como resíduo. Por fim realiza-se a separação do CHA, sendo este recuperado como resíduo, enquanto que a água e o benzeno são recolhidos como destilado. Nesta sequência a pureza do CHOL é garantida pela redução do arrastamento da anilina pelo destilado na coluna 1, e a pureza do CHA é garantida pela optimização da separação da coluna 3, onde se pretende reduzir o arrastamento de água e benzeno para resíduo, CHA.

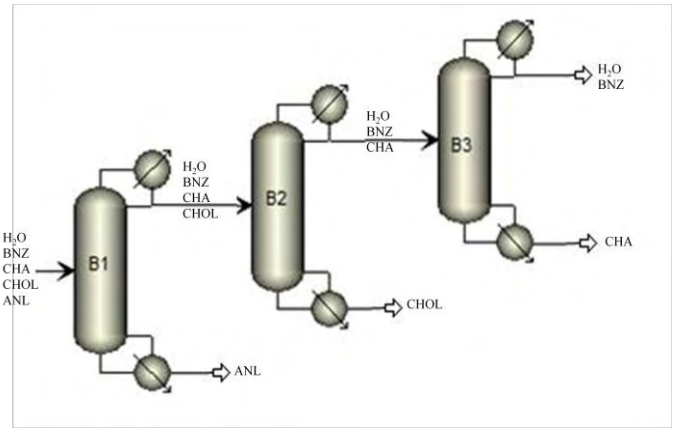

Figura 3.2: Representação esquemática da sequência 2.

Na sequência 3, Figura 3.3, na primeira coluna a água, o benzeno e o CHA são separados do CHOL e da anilina. Nas duas colunas seguintes obtêm-se os produtos desejados. Numa coluna existe a separação entre o CHA e o benzeno e a água, coluna 3, na outra coluna existe a separação do CHOL da anilina, coluna 2. O objectivo principal nesta sequência é optimizar a separação de forma evitar o arrastamento da anilina pelo destilado da coluna 2, de forma a garantir a pureza do CHOL, e garantir a pureza do CHA optimizando a separação da coluna 3 evitando o arrastamento do benzeno e da água pelo destilado.

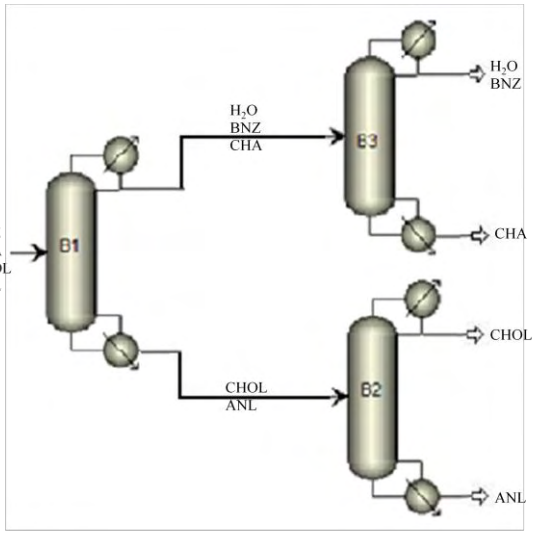

Figura 3.3: Representação esquemática da sequência 3.

Na sequência 4, Figura 3.4, na primeira coluna realiza-se a recuperação da água e do benzeno do resto da mistura. Na coluna 2 existe a recolha da anilina como resíduo. Por

fim na terceira coluna obtém-se a separação entre o CHA e o CHOL, o CHA é retirado como destilado e o CHOL como resíduo.

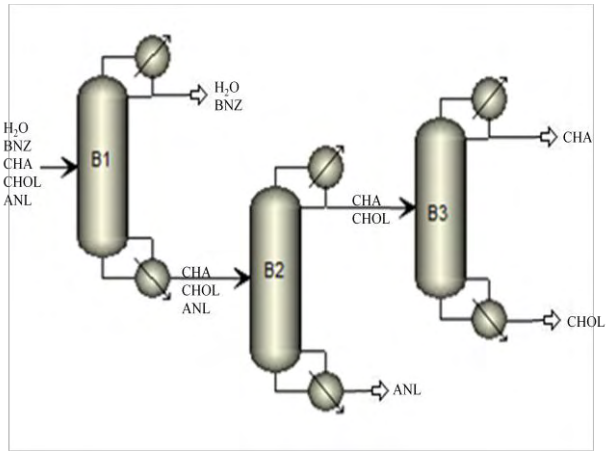

Figura 3.4: Representação esquemática da sequência 4.

Na sequência 5, Figura 3.5, na primeira coluna são retirados da mistura o benzeno e a água, como destilado. Na coluna 2 é recolhido o CHA como destilado. Por fim, na coluna 3, a anilina é separada do CHOL, e recuperada como resíduo e o CHOL como destilado.

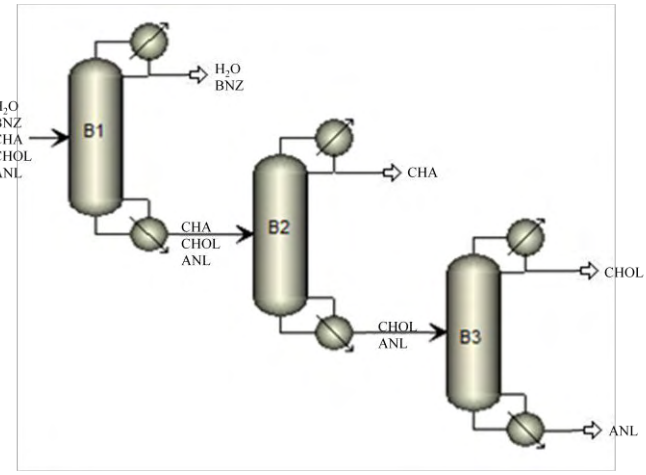

Figura 3.5: Representação esquemática da sequência 5.

A sequência ideal pode ser determinada a partir de simulações rigorosas de cada coluna, recorrendo a simuladores de processos químicos como o *Aspen*. No entanto também é possível ser identificada empiricamente através da utilização de regras heurísticas. As regras heurísticas indicam os caminhos ou possibilidades, para determinar a sequências de separação. As regras heurísticas são[13]:

1. Remover compostos reactivos, corrosivos, perigosos e termodegradaveis o mais cedo possível;
2. Remover produtos finais como destilados, em particular se forem reciclados a um reactor catalítico;
3. Remover o mais cedo possível os componentes mais abundantes na alimentação;
4. Ordenar as separações por ordem decrescente das volatilidades relativas, as separações mais difíceis ficam para o fim, na ausência dos outros componentes;
5. Deixar para o final as separações mais exigentes em termos da pureza;
6. Favorecer separações aproximadamente equimolares entre o topo e a cauda;

Este estudo tem como objectivo o estudo detalhado das sequências identificadas como 2, 4 e 5.

A aplicação das regras heurísticas, indicadas acima, permite identificar, de uma forma empírica, de entre estas três sequências, a sequência ideal. A sequência 2 apenas obedece à regra heurística 3. A sequência 4 obedece às regras 3, 4 e 5. A sequência 5 obedece às regras 2 e 3. Como se verifica a sequência que obedece ao maior número de regras é a sequência 4, logo esta seria a sequência ideal. Contudo, regra geral, estas regras originam conflitos que só podem ser resolvidos mediante um estudo mais detalhado da separação em causa. Para o caso particular da sequência 4 existe um conflito entre as regras 2 e 5 – se deixarmos a separação mais exigente para o final, a separação do CHA do CHOL, não podemos obter ambos os produtos finais como destilados. A selecção da sequência ideal passa pelo estudo detalhado de cada uma das sequências. Para este estudo serão usados os métodos rigorosos do simulador de processos químicos, *Aspen*.

Capítulo 4 – Optimização da Separação dos Compostos da Mistura

Nesta fase do projecto pretende-se determinar, de entre as sequências 2, 4 e 5, a sequência qual é aquela que permite a separação dos componentes da mistura em estudo com o menor custo, ou seja a sequência ideal.

4.1 Descrição da metodologia utilizada

Neste capítulo será apresentado em detalhe a metodologia aplicada para a determinação da sequência ideal.

Numa primeira fase foram realizados os balanços mássicos simplificados, relativos a cada uma das sequências em estudo admitindo separações *sharp*. Estes resultados permitem estimar alguns dos dados de partida para a utilização dos métodos simplificados do *Aspen*.

Utilizando então os métodos simplificados do *Aspen*, é possível determinar, para cada coluna de cada sequência, uma primeira estimativa para o número de andares, NP, o andar de alimentação, PA, e a razão de refluxo, RR, requeridos. Esta primeira estimativa serve como ponto de partida para a aplicação dos métodos rigorosos. O método rigoroso seleccionado é o modelo RADFRAC do *Aspen*.

O método utilizado na previsão da não idealidade da fase líquida é o método UNIFAC. A fase de vapor considera-se ideal, pois em todas as colunas opera-se à pressão atmosférica.

Por fim realiza-se a optimização de cada uma das sequências analisadas. A optimização é baseada numa função objectivo, que permite avaliar os custos de aquisição, e de operação para cada coluna de cada sequência.

Para a construção desta função objectivo é necessário conhecer, para cada coluna, e para os mesmos critérios de separação, os custos associados a diferentes configurações possíveis sendo cada uma destas configurações determinada pelo respectivo número de pratos, NP.

O objectivo será então encontrar o mínimo desta função para cada uma das três sequências. A sequência com o valor mínimo desta função será aquela à qual estará associado o menor custo para a separação em estudo.

O procedimento adoptado para cada sequência é, assim, comum às três sequências e encontra-se resumido abaixo:

1. Realização dos balanços de massa simplificados de forma a obter uma estimativa inicial dos caudais de destilado e resíduo em cada coluna;
2. Obtenção da estimativa inicial para o caudal de destilado, o número de andares, o andar de alimentação e a razão de refluxo, através dos métodos simplificados do *Aspen*. O método seleccionado é o método Winn-Underwood;
3. Utilização das estimativas iniciais obtidas no passo 2 como ponto de partida na aplicação dos métodos rigorosos do *Aspen*. O método seleccionado é o método RADFRAC. No entanto, para este projecto, verifica-se que na maioria dos casos as especificações deixam de ser cumpridas. Assim é necessário estudar, para cada coluna de cada sequência, o impacto que os parâmetros que mais influenciam a separação tem na qualidade dos produtos recuperados de forma a definir o(s) mais impostante(s) para a separação em causa. Estes serão o caudal de destilado, o número de andares e a razão de refluxo. De uma forma geral, o primeiro parâmetro a ser alterado é o caudal de destilado, pois é o parâmetro mais fácil de ajustar na operação de qualquer coluna de destilação. Apenas nos casos em que a alteração do caudal de destilado não se mostra suficiente é que se passa á optimização dos restantes parâmetros identificados acima;
4. A partir do momento em que as especificações do projecto são novamente cumpridas, é possível obter uma configuração inicial válida para cada coluna de uma determinada sequência. Esta configuração inicial é definida por um determinado número de pratos. A função objectivo de custos que permite determinar a configuração ideal de cada coluna é calculada com base em novas configurações, cada uma definida por um determinado número de pratos, diferente daquele correspondente à configuração inicial. Assim, o passo 3 será repetido para cada coluna de cada sequência de forma a permitir a construção da respectiva função objectivo. A configuração associada ao mínimo desta função objectivo será a configuração final de cada coluna de cada sequência. A sequência que apresentar o valor mínimo da soma dos mínimos de cada coluna será a sequência ideal.

4.1.1 Balanços de Massa

Analisando as sequências em cima apresentadas, Figura 3.1 à Figura 3.5, foram determinados os seguintes balanços materiais, considerando separações "sharp":

- Balanço de massa global a cada coluna;
- Balanço de massa a cada componente, em cada coluna.

Os valores utilizados nos cálculos foram fornecidos nos dados do problema, capítulo 3.

Balanço de Massa a cada Coluna:

$$F_i = V_i + L_i \qquad \text{Eq. 4.1}$$

onde: F = caudal de entrda;

V = caudal de líquido na cauda da coluna;

L = caudal de vapor no topo da coluna;

i = número da coluna, i = 1, 2, 3.

Balanço de massa a cada componente de cada coluna:

$$z_i^j F_i = x_i^j V_i + y_i^j L_i \qquad \text{Eq. 4.2}$$

onde: z_i^j = composição do componente j na corrente de entrada da coluna i;

x_i^j = composição do componente j na corrente de vapor da coluna i;

y_i^j = composição do componente j na corrente de líquido da coluna i.

Os valores obtidos para todos os caudais, permitem obter uma primeira estimativa dos caudais de destilado e resíduo em cada coluna. Os valores dos caudais serão posteriormente ajustados após a utilização dos métodos rigorosos do programa *Aspen Plus 2006.5*.

4.1.2 Aplicação dos Métodos Simplificados

Para se obter uma primeira estimativa do número de andares em cada coluna e da razão de refluxo requerida, recorreu-se ao programa *Aspen Plus* e aplicou-se o método simplificado, método Winn – Underwood – Gilliand, do *Aspen*.

Nesta fase especificou-se o número de andares, a pressão no condensador e no reebulidor e os componentes chave, para cada coluna de cada sequência. No caso da sequência 2 os dados introduzidos, na primeira coluna, foram:

- Número de andares: 10;
- Pressão no condensador: 1 atm;
- Pressão no reebulidor: 1 atm;
- Componentes chave: CHOL e anilina.

O que varia nas seguintes colunas desta sequência, coluna 2 e 3, são os componentes chave. Na coluna 2 os componentes chave são o CHA e o CHOL, na coluna 3 são o benzeno e o CHA.

Comparando as sequências 4 e 5 com a 2, os dados introduzidos são os mesmos no que diz respeito ao número de andares e à pressão no condensador e no reebulidor. No entanto os componentes chave variam em cada sequência e em cada coluna. No caso da sequência 4 na coluna 1 os componentes chave são o benzeno e o CHA, na coluna 2 são o CHOL e a anilina e na coluna 3 são o CHA e o CHOL. No caso da sequência 5 os componentes chave na coluna 1 são o benzeno e o CHA, na coluna 2 são o CHA e o CHOL, na coluna 3 são o CHOL e a anilina.

4.1.3 Aplicação do Método Rigoroso

Os resultados obtidos anteriormente, com o método simplificado, permitiram a aquisição dos dados para iniciar um método rigoroso. O método utilizado é o RADFRAC em *Aspen Plus 2006.5*.

Contudo, na maior parte dos casos, e como se verá no Capítulo 4.2, as especificações do projecto deixaram de ser cumpridas. Por esse motivo foi necessário estudar, para cada coluna, a influência dos parâmetros que maior impacto têm na separação. Estes parâmetros são:

- Número de andares da coluna;
- Razão de refluxo;
- Andar de alimentação;
- Caudal de destilado.

O diagrama seguinte, Figura 4.1, permite uma melhor compreensão do procedimento utilizado na procura da configuração inicial de cada coluna de cada sequência, ou seja, a configuração das colunas que permite cumprir todos os requisitos do problema.

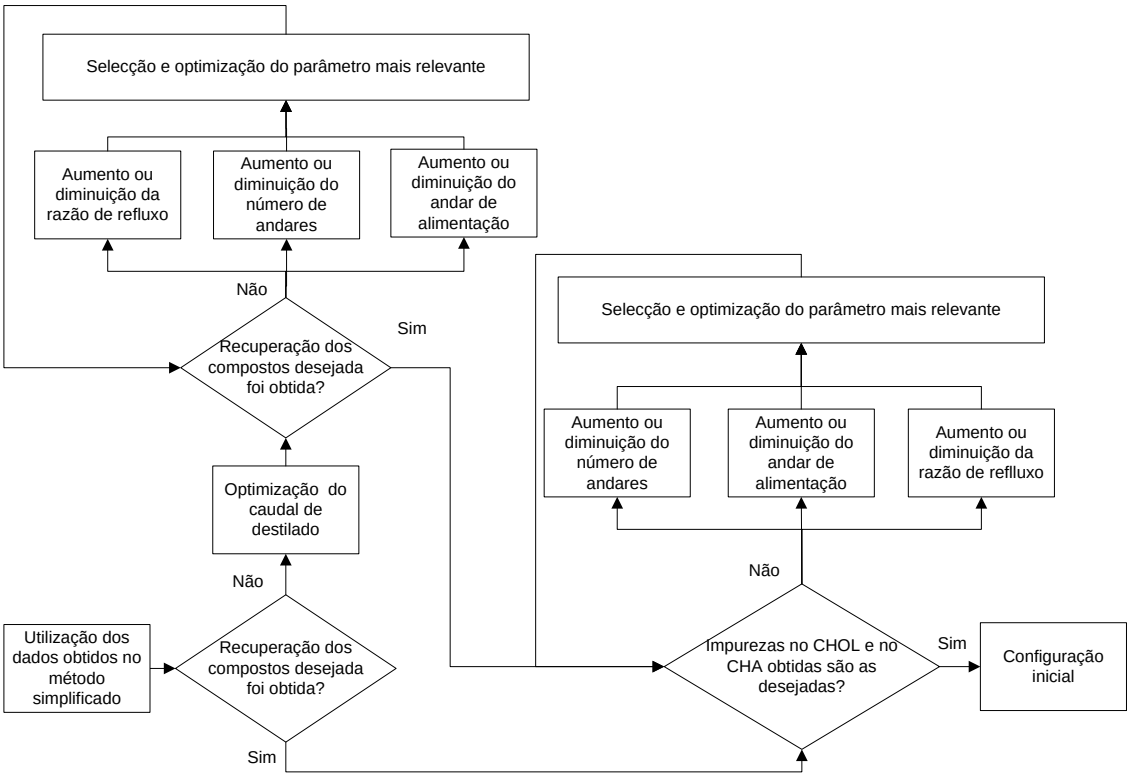

Figura 4.1: Procedimento utilizado na determinação da configuração inicial de cada sequência.

O primeiro parâmetro a ser alterado é o caudal de destilado, dado que este é o parâmetro mais fácil de ajustar a nível da operação da coluna. Apenas nos casos onde o simples ajuste do caudal de destilado não é suficiente para garantir, novamente, as especificações do projecto, opta-se por alterar os restantes parâmetros, indicados acima.

No caso da sequência 2, como se verá no Capítulo 4.2, foi ainda necessária a introdução de um decantador líquido-líquido na alimentação da coluna 3, a coluna onde é efectuada a separação da água e do benzeno. Com efeito, nas condições da alimentação verifica-se a existência de três fases ao longo da coluna (fase aquosa composta essencialmente pela água da alimentação, a fase orgânica, constituída essencialmente pelo benzeno existente na alimentação, e a fase de vapor). Neste caso, o equilíbrio LV ao longo da coluna aplicado é substituído por um cálculo tipo ELLV e não o simples ELV (método

por defeito). Nesta situação verifica-se que não é possível obter a taxa de recuperação desejada do CHA independente da configuração estudada.

Este decantador foi simulado utilizando a método UNIFAC. Para garantir uma separação eficiente das duas fases foi considerado o arrefecimento do destilado da coluna 2 até à temperatura ambiente através da introdução de um permutador de calor. Este permutador foi simulado utilizando o módulo HeatX.

4.1.4 Definição da Função Objectivo

A selecção da sequência ideal tem por base o valor mínimo de uma função objectivo de custos. Neste caso a optimização tem por objectivo a diminuição dos custos totais, necessários à implementação de cada sequência.

A optimização foi efectuada com base na seguinte função objectivo[20]:

$$C_{TA}^{k} = C_{CU}^{k} + C_{HU}^{k} + C_{C}^{k} + C_{R}^{k} + C_{SHE}^{k} + C_{INT}^{k} + C_{DEC} \qquad \text{Eq. 4.3}$$

onde, C_{CU}^{k} = custos de operação dos condensadores, k€/ano;

C_{HU}^{k} = custos de operação dos reebulidores, k€/ano;

C_{C}^{k}, C_{R}^{k}, C_{SHE}^{k}, C_{INT}^{k} = custos de aquisição da coluna, k€/ano;

C_{DEC} = custo do decantador (quando aplicável), k€/ano.

Os valores do C_C, do C_R, do C_{SHE} e do C_{INT}, são estimados através das seguintes correlações[20]:

$$C_{C}^{k} = G_{EC}^{0}\, 10^{(G_{EC}^{1} + G_{EC}^{2}\, log_{10}(A_{C}^{k}))} \qquad \text{Eq. 4.4}$$

$$C_{R}^{k} = G_{EC}^{3}\, 10^{(G_{EC}^{4} + G_{EC}^{5}\, log_{10}(A_{R}^{k}) + G_{EC}^{6}\, (log_{10}(A_{REB}^{k}))^{2})} \qquad \text{Eq. 4.5}$$

$$C_{SHE}^{k} = G_{COL}^{0}\, 10^{(G_{COL}^{1,k} + G_{COL}^{2,k}\, log_{10}(h_{SHE}^{k}) + G_{COL}^{3,k}\left(log_{10}(h_{SHE}^{k})\right)^{2})} \qquad \text{Eq. 4.6}$$

$$G_{COL}^{1,k} = G_{COL}^{4} + G_{COL}^{5}\, d_{SHE}^{k}, \qquad G_{COL}^{2,k} = G_{COL}^{6} + G_{COL}^{7}\, d_{SHE}^{k}, \qquad \text{Eq. 4.7}$$

$$G_{COL}^{3,k} = G_{COL}^{8} + G_{COL}^{9}\, d_{SHE}^{k} \qquad \text{Eq. 4.8}$$

$$C_{INT}^{k} = G_{COL}^{10}\, 10^{(G_{COL}^{11,k} + G_{COL}^{12,k}\, log_{10}(h_{INT}^{k}))} \qquad \text{Eq. 4.9}$$

$$G_{COL}^{11,k} = G_{COL}^{13} + G_{COL}^{14}\, d_{INT}^{k},\ G_{COL}^{12,k} = G_{COL}^{15} + G_{COL}^{16}\, d_{INT}^{k} \qquad \text{Eq. 4.10}$$

onde, G_{COL}^{i} = factor que varia com o tipo de equipamento em causa.

A partir das correlações anteriores, Equação 4.4 à 4.10, é possível concluir que os custos de aquisição estão relacionados com as dimensões dos equipamentos. Os custos de aquisição esta relacionados com:

- Área dos condensadores e dos reebulidores, A_C e A_R;
- Diâmetro e altura da coluna, d_{INT}, d_{SHE}, h_{INT} e h_{SHE}.

Como se pode analisar, através das equações seguintes, Equação 4.11 à 4.15, as dimensões dos equipamentos são dependentes de algumas variáveis.[20]

$$A_C^k\, U_C\, \Delta T_C^k = Q_C^k \qquad \text{Eq. 4.11}$$

$$\Delta T_C^k \ln(\chi^k) = \left(T_{CU,out} - T_{CU,inl}\right),\ \chi^k\left(T_C^k - T_{CU,out}\right) = T_C^k - T_{CU,inl} \qquad \text{Eq. 4.12}$$

$$A_R^k\, U_R\, \left(T_R^k - T_{HU}\right) = Q_R^k \qquad \text{Eq. 4.13}$$

$$h_{SHE}^k \simeq \left(h_{INT}^k + \Delta h\right) \simeq h_{COL}^k,\ h_{INT}^k = HETP^k \times np^k \qquad \text{Eq. 4.14}$$

$$d_{SHE}^k \simeq d_{INT}^k \simeq d_{COL}^k,\ d_{INT}^k = \sqrt{\frac{4V^{np,k}}{0.9\pi\rho v\, \vartheta_v}},\ \vartheta_v = 0.6\vartheta_{FL} \qquad \text{Eq. 4.15}$$

onde, A_C^k e A_R^k = área do condensador e do reebulidor, respectivamente, m^2;

$T_{CU,out}$ = temperatura de saída, ºC;

$T_{CU,inl}$ = temperatura de entrada, ºC;

χ^k = variável auxiliar;

ϑ_v = velocidade do gás, m/s;

ΔT_C^k = media logarítmica da temperatura da coluna, ºC;

Q_C^k = calor transferido do condensador, J/s;

Q_R^k = calor transferido do reebulidor, J/s.

A determinação dos parâmetros, das dimensões da estrutura da coluna, envolve uma metodologia complexa. A estimativa das alturas e dos diâmetros das colunas, requer um conhecimento prévio do tipo de enchimento a utilizar e das suas características.[20]

O processo de cálculo é contudo facilitado, pois cada fornecedor apresenta os seus próprios dados para o tipo de enchimento. As características do enchimento utilizado neste trabalho correspondem ao MellapackPlus 452.Y.

As equações 4.16 e 4.17 permitem a avaliação dos custos de investimento, no entanto representam uma correlação mais simples.[20]

$$C_{COL}^k = 12.810 + 16.3530\, d_{INT}^k + 24.404\, (d_{INT}^k)^2 + \\ +3.719\, h_{INT}^k + 5.081\, d_{INT}^k\, h_{INT}^k + 3.836(d_{INT}^k)^2\, h_{INT}^k + 0.174(h_{INT}^k)^2 - 0.108\, d_{INT}^k\, (h_{INT}^k)^2 - \\ -0.200\, (d_{INT}^k)^2\, (h_{INT}^k)^2 \qquad \text{Eq. 4.16}$$

$$C_{EC}^{k} = 14.003 + 0.223\, A_{C}^{k} + 1.178\, A_{R}^{k} - 0.010\, (A_{R}^{k})^{2}$$ Eq. 4.17

Para além dos custos relativos às colunas de destilação e aos permutadores de calor, ainda têm que ser avaliados os custos de investimento para os decantadores, no caso das sequências que os envolvam, Equação 4.18. Na equação referente aos custos de investimento do decantador é assumido que se opera à pressão ambiente e o decantador é constituído em aço carbono.[21]

$$C_{DEC} = 10^{(k_1 + k_2 \times log\,(A)) + k_3 \times log\,(A)^2}$$ Eq. 4.18

onde: A = parâmetro do tamanho do equipamento, m;

k_1, k_2 e k_3 variam com a variação do diâmetro do decantador, estes valores encontram-se no Anexo IV, Tabela IV.1.

No caso de separadores do tipo líquido-líquido:

- A razão entre o comprimento e o diâmetro deve estar compreendida entre 2 e 4, no entanto o valor óptimo atribuído é 3;
- O tempo de residência deve estar compreendido entre os 600s e os 1200s;
- Os vasos contendo líquidos têm orientação horizontal;
- Os separadores tipo líquido-líquido são dimensionados para uma velocidade terminal, u_t, compreendida entre 0,0085 e 0,00127 m/s;
- A velocidade superficial da fase contínua, u_c, é sempre inferior a 8 u_t e os decantadores são dimensionados com base nesta velocidade.[21]

O diâmetro pode ser determinado através da seguinte equação[21]:

$$D = \sqrt{\frac{4}{\pi}\frac{Q_{mist}}{u_c}}$$ Eq. 4.19

$$L = 3D$$ Eq. 4.20

onde, D = diâmetro do decantador, m;

Q_{mist} = caudal volumétrico, m^3/s;

u_c = velocidade superficial da fase continua, m/s;

L = comprimento do decantador, m.

O valor determinado para o custo do decantador, representa o custo do decantador em 1996. Por este motivo é necessário realizar a actualização do custo do decantador para o ano de 2009. É possível realizar essa actualização com base na seguinte equação[11]:

$$C_{DEC}^{2009} = C_{DEC}^{1996} \times \frac{I_{2008}}{I_{1996}}$$ Eq. 4.21

onde, C_{DEC}^{i} = custo do decantador no ano i, €;

I_i = índice de actualização do ano i.[28]

O valor do índice de actualização do ano 1996 é 382 e o do ano 2008 é 618,3.

4.1.5. Metodologia Seguida na Optimização das Sequências 2, 4 e 5

Na secção 4.1.3 foram obtidas as configurações iniciais para todas as sequências em estudo e correspondem ao primeiro ponto da função objectivo em causa. É necessário contudo determinar novos pontos da função objectivo definida anteriormente. Para tal, para cada coluna de cada sequência serão determinadas configurações alternativas baseadas na alteração do número de andares. O diagrama seguinte, Figura 4.2, permite um melhor entendimento do processo de optimização de cada coluna de cada sequência.

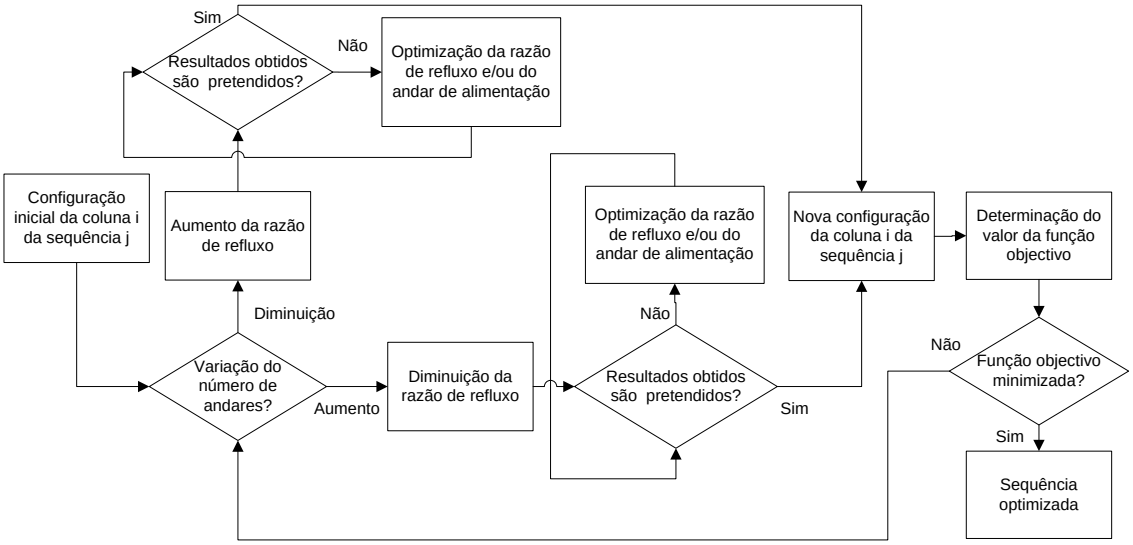

Figura 4.2: Procedimento utilizado na optimização de cada coluna, em cada sequência estudada.

Esta metodologia permite obter para cada coluna de cada sequência a configuração à qual está associado o menor custo (valor mínimo da respectiva função objectivo).

É de notar que a optimização foi realizada coluna a coluna em cada sequência, ou seja, inicia-se a optimização na coluna 1 e continua-se até à coluna 3. A optimização em cada coluna tem por objectivo encontrar as condições a que a coluna opera a um custo total o mais baixo possível.

4.2 Resultados

Os resultados obtidos pela resolução dos balanços de massa simplificados permitem uma primeira estimativa para os caudais de entrada, saída no topo e saída na cauda de cada coluna de cada sequência. Estes encontram-se no Anexo III, Tabela III.1, III.2 e III.3.

Estes valores foram introduzidos como estimativas iniciais para o método simplificado Winn-Underwood-Gilliand, do *Aspen*, com o qual foi possível obter-se uma primeira estimativa para o número de andares, o andar de alimentação e a razão de refluxo de cada coluna de cada sequência. Estes serviram, por sua vez, como parâmetros de partida para aplicação dos métodos rigorosos.

Para cada sequência são, assim, obtidos os valores da razão de refluxo mínima, do número de andares, do andar de alimentação, do caudal de destilado e do número de andares mínimo, para cada coluna.

Os resultados da aplicação do método simplificado para cada coluna encontram-se nas Tabelas 4.1 à 4.3.

Tabela 4.1: Resultados obtidos na aplicação do método simplificado do *Aspen* na sequência 2.

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Razão de refluxo mínima	0,23	0,14	0,05
Número de andares	10	65	11
Razão de refluxo	2,71	0,27	0,12
Andar de alimentação	7	32	5
Número de andares mínimo	9	32	4
Caudal de destilado (kg/h)	212,63	184,83	144,14

Tabela 4.2: Resultados obtidos na aplicação do método simplificado do *Aspen* na sequência 4.

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Razão de refluxo mínima	0,05	4,17	1,29
Número de andares	10	21	44
Razão de refluxo	0,12	4,87	1,57
Andar de alimentação	5	14	14
Número de andares mínimo	4	11	22
Caudal de destilado (kg/h)	144,19	68,47	40,71

Tabela 4.3: Resultados obtidos na aplicação do método simplificado do *Aspen* na sequência 5.

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Razão de refluxo mínima	0,05	3,27	10,14
Número de andares	10	24	26
Razão de refluxo	0,12	3,83	11,59
Andar de alimentação	5	12	18
Número de andares mínimo	4	12	13
Caudal de destilado (kg/h)	144,19	40,72	27,76

Com a introdução directa dos resultados obtidos pelo método simplificado como parâmetros de partida para o método rigoroso, verifica-se, na maior parte dos casos, que as especificações de projecto pretendidas não são obtidas sendo necessário alterar os parâmetros chave da coluna (numero de andares, razão de refluxo, caudal de estilado e andar de alimentação) de forma a garantir as especificações desejadas. A metodologia foi baseada no diagrama da Figura 4.1. Apresentam-se de seguida os resultados da aplicação desta metodologia a cada uma das três sequências em estudo.

Sequência 2

No caso da sequência 2, quando foram introduzidos os valores, obtidos no método simplificado no método rigoroso não foi possível obter algumas das especificações pretendidas – a recuperação mínima do CHA, do CHOL e do benzeno não foi obtida. As impurezas presentes no CHA e no CHOL foram superiores às desejadas.

Na coluna 1 verificou-se o arrastamento da anilina para o destilado, o que origina a contaminação do CHOL na base da coluna 2. De forma a reduzir o arrastamento da anilina diminui-se o caudal de destilado. No entanto, a alteração do caudal de destilado não foi suficiente para diminuir as impurezas do CHOL na coluna 2. Verifica-se, nesta coluna, que o parâmetro mais relevante na separação desejada é o número de pratos, tendo sido este o parâmetro optimizado para esta coluna. O aumento do número de andares permite uma ligeira diminuição da razão de refluxo.

Na coluna 2 é realizada a remoção do CHOL, pelo resíduo, como produto desejado. Neste caso, verifica-se ser necessário diminuir o número de andares (consequentemente diminuir o andar de alimentação) e aumentar a razão de refluxo. Na coluna 2 a taxa de recuperação do CHOL foi atingida com as alterações da coluna 1. Contudo para evitar a

contaminação do CHA com CHOL, na coluna 3, verifica-se ser necessário optimizar o número de andares e a razão de refluxo desta coluna.

Na coluna 3, o problema reside na quantidade de água que se encontra a contaminar o CHA, que é recuperado como produto através do resíduo. O aumento de caudal de destilado não veio resolver este problema pois limita a taxa de recuperação do CHA. Para esta coluna não foi possível definir uma configuração inicial (com base na optimização dos parâmetros mais relevantes) que permita a separação da água/benzeno do CHA verificando-se sempre o arrastamento significativo de água para a base da coluna. Assim, e de forma a eliminar a água na alimentação desta coluna foi introduzido um decantador na corrente de destilado da coluna 2. Os restantes parâmetros foram posteriormente optimizados de forma a conseguir a taxa de recuperação e a pureza do CHA.

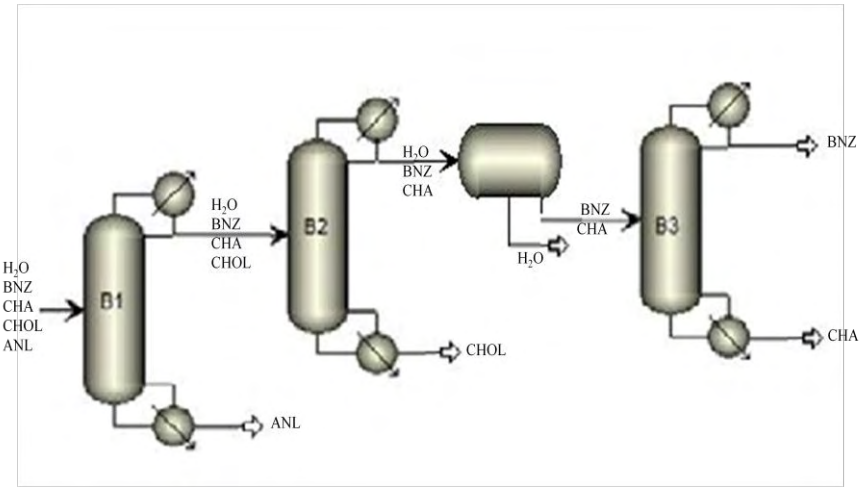

Figura 4.3: Nova representação esquemática da sequência 2.

<u>Sequência 4</u>

Na sequência 4, quando foram introduzidos os valores, obtidos no método simplificado, no método rigoroso não foi possível obter algumas das especificações pretendidas. A recuperação mínima do CHA, do CHOL e do benzeno não foi obtida. As impurezas presentes no CHA e no CHOL foram superiores às desejadas.

Na coluna 1, a recuperação do benzeno como destilado não é suficiente, face ao desejado. Se a recuperação de benzeno for inferior à desejada, este vai contaminar o CHA na coluna 2. Para aumentar a recuperação do benzeno aumentou-se o caudal de destilado. Dado que o aumento deste caudal está limitado pela perda de carga de CHA pelo destilado desta coluna, foi necessário reduzir a razão de refluxo de modo a cumprir os objectivos pretendidos.

Na coluna 2, a recuperação da anilina atingida é a pretendida, no entanto há ainda uma contaminação do CHOL pela anilina, na coluna 3. Neste caso, o caudal de destilado deve ser diminuído, permitindo assim a diminuição do arrastamento da anilina no destilado. No entanto a alteração do caudal de destilado não foi suficiente para diminuir a contaminação do CHOL na coluna 3 sendo assim necessário estudar a influência dos restantes parâmetros nesta separação. Verificou-se que é necessário subir o número de andares da coluna (ajustando a localização do andar de alimentação), assim como a razão de refluxo.

Na coluna 3, realiza-se a separação do CHA do CHOL. Verifica-se que esta é uma das separações mais difíceis desta sequência. Todos os parâmetros relevantes foram optimizados de forma a ser possível obter os requisitos desejados para o CHA e para o CHOL – de forma a impedir o arrastamento do CHOL no destilado, foi reduzido o caudal de destilado. No entanto de forma a ser possível obter a recuperação desejada do CHA foi necessário aumentar o número de andares e a razão de refluxo.

Sequência 5

Na sequência 5, quando foram introduzidos os valores, obtidos no método simplificado, no método rigoroso não foi possível obter algumas das especificações pretendidas. A recuperação mínima do CHA, da anilina e do benzeno não foi obtida. As impurezas presentes no CHA e no CHOL foram superiores às desejadas.

Na coluna 1, a recuperação do benzeno é inferior à desejada, contaminando o CHA. Para aumentar a recuperação do benzeno como destilado, aumenta-se o caudal de destilado. Neste caso apenas foi necessária uma ligeira redução na razão de refluxo para serem atingidos os objectivos pretendidos nesta coluna.

Na coluna 2, a recuperação do CHA está abaixo da desejada. O CHA é recuperado através do destilado. Para aumentar a sua recuperação aumenta-se o caudal de destilado. No entanto o aumento do caudal de destilado aumentou o arrastamento do CHOL para o destilado limitando a sua taxa de recuperação, sendo necessários estudar a influência dos restantes parâmetros relevantes nesta separação. Este estudo mostra que é necessário aumentar o número de andares (reajustando o andar de alimentação) e a razão de refluxo para garantir as especificações do CHA.

Na coluna 3, não é agora cumprida a recuperação e a pureza especificada para o CHOL. Para aumentar a recuperação do CHOL foi necessário aumentar o caudal de destilado, contudo isto leva a um arrastamento significativo da anilina para o destilado. Novamente foi necessário estudar a influência dos restantes parâmetros nesta separação. Para cumprir a especificação do CHOL é então necessário aumentar o número de andares. Este aumento do número de andares permite uma ligeira diminuição na razão de refluxo.

Na tabela 4.4 resume-se a configuração inicial de cada coluna das três sequências anteriores. Esta configuração, caracterizada por um determinado número de andares, é o ponto de partida para a optimização de cada uma destas colunas.

Tabela 4.4: Configuração inicial de cada coluna de cada sequência.

	Coluna	Caudal de destilado (kg/h)	Número de pratos	Razão de refluxo	Prato de alimentação
Sequência 2	1	209	30	2,117	25
	2	185	31	5,100	5
	3	129	10	0,214	4
Sequência 4	1	149	10	0,014	3
	2	61	40	8,000	35
	3	38	48	3,750	8
Sequência 5	1	150	10	0,047	5
	2	37	100	7,870	13
	3	24	55	8,420	45

Os perfis de concentração associados a cada sequência encontram-se no Anexo III, nas Tabelas III.4 à III.6. Foi com base nestes perfis que se procedeu à optimização de cada uma das colunas desta três sequências.

A aplicação da metodologia apresentada no diagrama da Figura 4.2 permitiu a construção da função objectivo para cada uma das colunas das três sequências.

Nas tabelas do Anexo III, Tabela III.7 à III.15, são apresentados os resultados obtidos para os custos de aquisição, os custos de operação e os custos totais, das optimizações das três sequências em estudo. Os resultados obtidos, para cada coluna de cada sequência, foram representados através de gráficos, no Anexo III, Figura III.1 à III.3.

Para seleccionar a sequência ideal é necessário agora comparar os resultados obtidos das três sequências optimizadas. Na tabela seguinte, Tabela 4.5, são apresentados os resultados da optimização de cada coluna de cada sequência.

Tabela 4.5: Resultados obtidos na optimização das sequências 2, 4 e 5.

Coluna		Prato Alimentação	Número de andares	Razão de refluxo	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
Sequência 2	1	29	35	1	25,04	25,98	51,02
	2	5	40	0,2100	17,00	11,81	28,81
	3	4	10	0,2140	7,91	8,20	16,11
	D	-	-	-	1,35	-	1,35
		Total			51,95	45,99	97,29
Sequência 4	1	3	10	0,0135	10,23	16,24	26,47
	2	47	55	4,0850	21,51	11,15	32,66
	3	9	55	3,1500	14,39	6,69	21,08
		Total			46,13	34,08	80,21
Sequência 5	1	3	8	0,1196	9,77	16,88	26,64
	2	10	45	11,2000	20,69	13,04	33,72
	3	45	55	8,4200	19,30	9,37	28,67
		Total			49,76	39,29	89,03

É possível compreender melhor os resultados obtidos e registados, na Tabela 4.5, através da análise da Figura 4.4, onde os resultados estão apresentados na forma de barras.

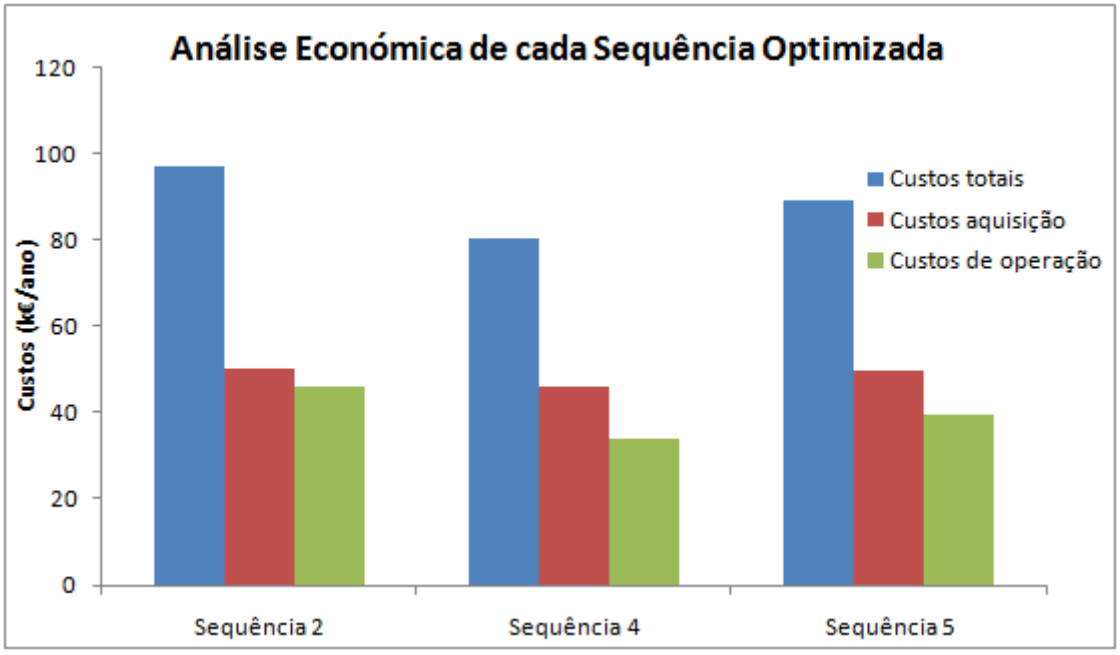

Figura 4.4: Representação gráfica da análise económica de cada sequência optimizada.

Independentemente do erro associado aos cálculos dos custos de aquisição, dado que estes são semelhantes para qualquer uma das três sequências, a sequência ideal será aquela que apresenta menores custos de operação. Neste projecto a sequência com um custo total mais baixo é a sequência 4, como se mostra na Figura 4.4.

A sequência 2 é penalizada pelo elevado custo de operação da primeira coluna. A separação inicial da sequência 4 é semelhante à separação inicial da sequência 5 sendo por isso os custos de operação (e de investimento) semelhantes. Contudo, a sequência 5 é penalizada pelos maiores custos de operação das colunas seguintes.

Analisando mais em detalhe as separações em causa, na sequência 4 e 5, conclui-se que a separação inicial é a mais fácil – separa o benzeno da água dos restantes compostos. Dado que nesta coluna o caudal a tratar é o maior (alimentação), reduz-se assim o número de pratos para a coluna que teoricamente teria o maior diâmetro, resultando em custos inferiores para a primeira coluna destas duas sequências. Em suma, dado que caudais superiores de entrada obrigam a diâmetros superiores, as separações mais fáceis, na mesma coluna, permitirão reduzir o número de andares diminuindo os custos de investimento (regra heurística 3).

A principal diferença entra a sequência 4 e a 5 verifica-se ao nível dos custos relacionados com a coluna 3. Na coluna 3 da sequência 4 dá-se a separação do CHA e do CHOL, que apesar de ser uma separação difícil e implicar um maior número de andares, o caudal a tratar é muito baixo, o que permite um diâmetro da coluna inferior, reduzindo assim os custos de aquisição. Dado que os custos de aquisição são os mais baixos, os custos totais também o são. Na coluna 3 da sequência 5 a separação é relativamente fácil. No entanto o caudal a tratar é elevado, dado que se recupera toda a anilina da alimentação, que ainda corresponde a cerca de 60% do caudal inicial, o que penaliza os custos de aquisição pelo maior diâmetro da coluna e os custos de operação pelo caudal de refluxo.

Pela análise das regras heurísticas a sequência ideal era a 4, o que se veio a verificar após o estudo detalhado das três sequências.

É importante referir ainda que a introdução do decantador na sequência 2, apesar de não ter um impacto significativo nos custos de aquisição, introduz uma maior complexidade de operação e obriga a sistemas adicionais de controlo (nível da interface).

Capítulo 5 – Diagrama de Controlo de Processo e Instrumentação, P&I

O controlo de colunas de destilação é um processo complexo. Existem vários tipos de colunas de destilação, consequentemente existem diferentes tipos de estratégias de controlo. Os factores que influenciam a selecção do controlo incluem as propriedades dos produtos, a razão de refluxo, a pressão no interior da coluna, os custos associados ao consumo de energia, dimensões da coluna e a composição da mistura que entra na coluna.[22]

As variáveis que devem ser controladas são:

- Composição do fluxo de destilado, para garantir a qualidade do produto;
- Composição do fluxo de resíduo, para garantir a qualidade do produto;
- Nível do líquido no tambor de refluxo, para manter o balanço material;
- Nível de líquido na base da coluna, para manter o balanço de massa;
- A pressão da coluna, para manter o balanço de energia e a relação de equilíbrio que é afectada por mudanças de pressão.[22]

Os dois distúrbios principais que existem numa coluna de destilação são o caudal de alimentação e a composição da alimentação.

Controlo da pressão

O controlo da pressão é necessário, de forma a garantir que não existem alterações no balanço de massa. A alteração da pressão vai afectar a volatilidade relativa, a alteração da temperatura na coluna e no condensador e também pode por em causa a segurança do processo. A pressão pode ser controlada por diferentes métodos[23]:

- "Vent" para a atmosfera;
- Água de refrigeração;
- Inundação do condensador.[23]

O mais utilizado é o controlo através de água de refrigeração. Neste caso se o caudal de água de refrigeração aumentar então aumenta a quantidade de vapor condensado, reduzindo a pressão do vapor, Figura 5.1.[23]

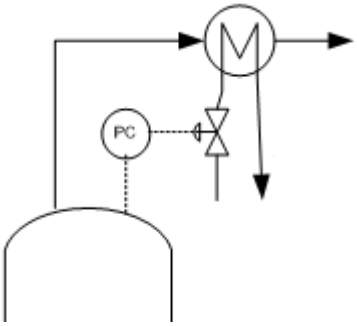

Figura 5.1: Controlo da pressão, no topo da coluna, através da água de refrigeração.

Controlo da composição

Quando a recuperação do produto desejado é feita como destilado (caso da coluna 3 da sequência 4), é necessário estabelecer o método a utilizar no controlo da composição no topo da coluna. Assim como no controlo da pressão, existem vários métodos para controlar a composição no topo da coluna. O método mais comum é o controlo da razão de refluxo. Neste tipo de controlo a quantidade de refluxo é alterada de acordo com a composição do destilado através da utilização de um analisador em linha. No caso de não ser viável a aplicação de um analisador em linha é possível substituir a variável controlada (composição do destilado) pelo controlo da temperatura no primeiro prato da coluna de destilação. Com efeito, a cada perfil de concentrações está associada uma determinada temperatura definida pela equação líquido-vapor da coluna em causa, ou seja, o controlo da temperatura permite um controlo indirecto da composição no topo. A Figura 5.2 representa o tipo de controlo escolhido.[23]

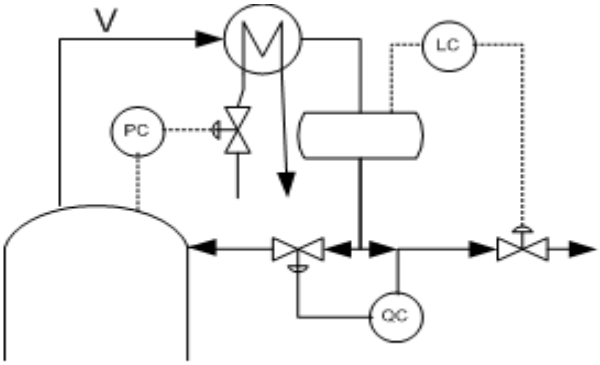

Figura 5.2: Controlo da composição, no topo da coluna, através da razão de refluxo.

É necessário escolher também o método para o controlo da composição na cauda da coluna. A composição na cauda da coluna, e à semelhança do que ficou dito acima para a

composição de topo, é geralmente controlada indirectamente através da temperatura da cauda da coluna. O controlo do nível da base da coluna é efectuado através do controlo do caudal de resíduo, na cauda da coluna. Na Figura 5.3 está representado o tipo de controlo escolhido para o controlo da composição e nível da base da coluna.[22]

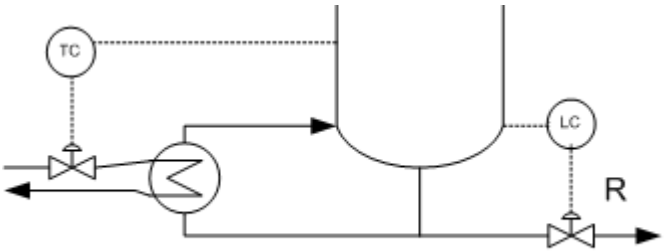

Figura 5.3: Controlo da composição, na cauda da coluna, através do controlo do caudal de resíduo.

Depois de definidos os controlos da pressão e das composições no topo e na cauda da coluna, o diagrama simplificado do processo e instrumentação (P&I), da separação em estudo, está concluído.

Na figura 5.4 está representado o diagrama P&I para a sequência ideal, ou seja, para a sequência 4.

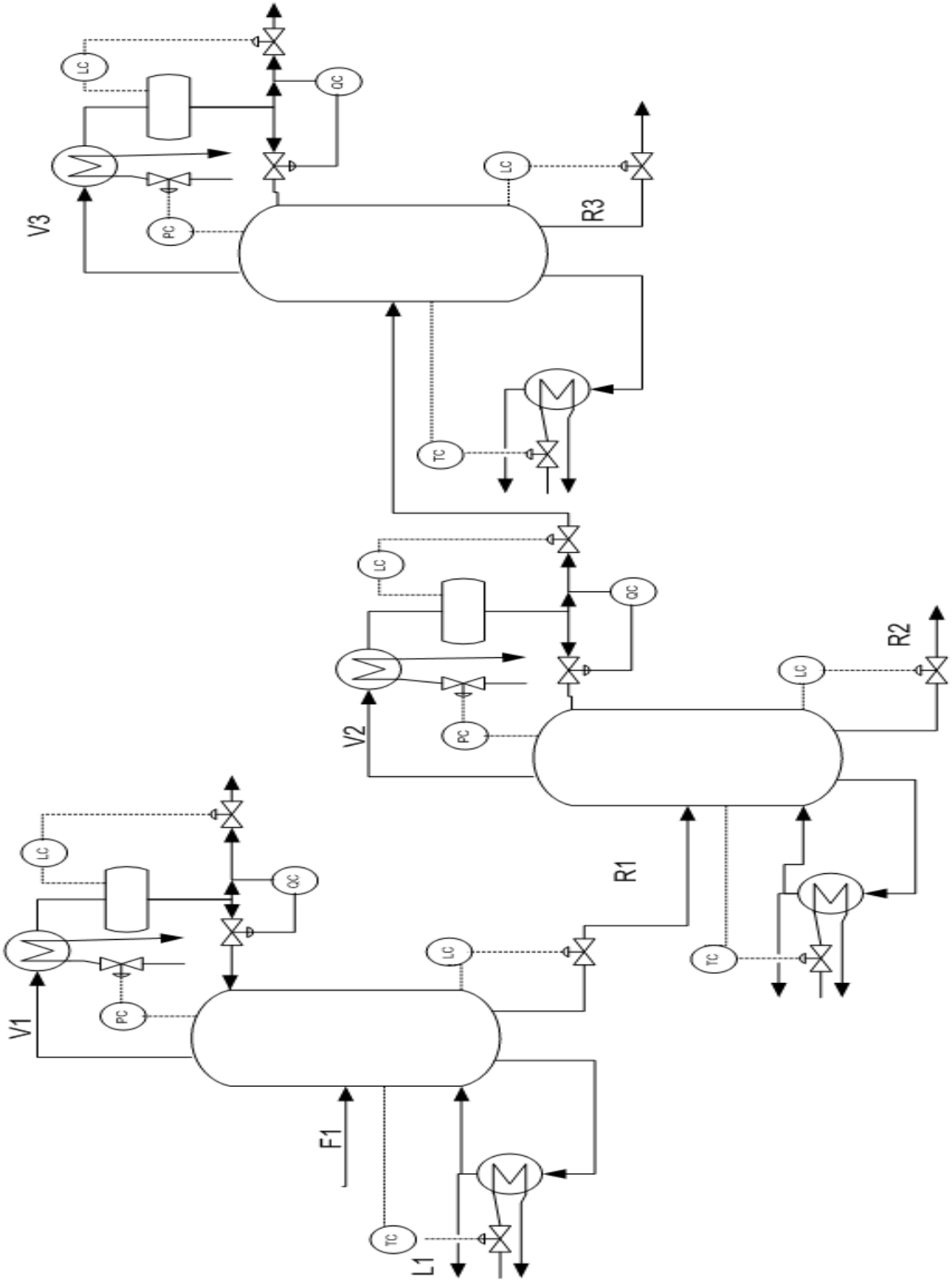

Figura 5.4: Controlo P&I da sequência 4.

Capítulo 6 – Dimensionamento dos Condensadores e Reebulidores

A transferência de calor e de fluidos, é parte essencial nos processos químicos, tal como acontece na destilação. É importante desenvolver um projecto fiável no que diz respeito ao dimensionamento dos permutadores de calor, neste caso condensadores e reebulidores.

Neste capítulo, são descritas as metodologias utilizadas no dimensionamento dos permutadores de calor utilizados. As metodologias aplicadas no dimensionamento dos condensadores são semelhantes às aplicadas nos reebulidores, apenas diferindo no cálculo dos coeficientes de filme. O tipo de condensador escolhido foi o condensador horizontal de carcaça e tubos com condensação no exterior. O tipo de reebulidor escolhido foi o termosifão vertical.

6.1 Procedimento básico para o dimensionamento dos permutadores

O principal objectivo do dimensionamento de um permutador de calor é a determinação da área de superfície necessária a uma determinada taxa de transferência de calor, para uma determinada diferença de temperatura. A equação geral da transferência de calor é[10]:

$$Q = U\,A\,\Delta T_{ml} \qquad \text{Eq. 6.1}$$

onde: Q = calor transferido por unidade de tempo, W;

U = coeficiente global de transferência de calor, W/ m^2ºC;

A = área de transferência, m^2;

ΔT_{ml} = media logarítmica das temperaturas, ºC.

Por sua vez o coeficiente global é o inverso da soma do inverso das várias resistências individuais à transferência de calor, como é representado na seguinte equação[]10:

$$\frac{1}{U_0} = \frac{1}{h_0} + \frac{1}{h_{0d}} + \frac{d_0\,ln\left(\frac{d_0}{d_i}\right)}{2k_w} + \frac{d_0}{d_i} \times \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_0}{d_i} \times \frac{1}{h_i} \qquad \text{Eq. 6.2}$$

onde: U_0 = coeficiente global com base na área externa do tubo, W/m^2ºC,

h_0 = coeficiente da película do fluido, W/m^2ºC,

h_i = coeficiente do filme liquido, W/m^2°C;

h_{0d} = coeficiente sujidade do lado do líquido, W/m^2°C;

h_{id} = coeficiente sujidade do lado dos tubos, W/m^2°C;

k_w = condutividade térmica do material da parede do tubo, W/m^2°C;

d_i = diâmetro interno dos tubos, m;

d_0 = diâmetro externo dos tubos, m.

Os coeficientes individuais, vão depender da natureza do processo de transferência de calor (condensação, vaporização), das propriedades físicas dos fluidos, dos caudais dos fluidos e do arranjo físico da superfície de transferência de calor. De facto, o dimensionamento do permutador de calor não pode ser efectuado sem antes ser conhecida a configuração do mesmo (número e diâmetro dos tubos e o seu comprimento). Dado que estes parâmetros afectam os coeficientes individuais de filme, o cálculo de um permutador é feito recorrendo a um processo iterativo.

Como se referiu em cima, é necessário estabelecer as dimensões dos tubos do permutador de calor. Os tubos do permutador, normalmente, estão dispostos num triangulo equilátero, num quadrado ou num quadrado rodado, Figura 8.1.[10]

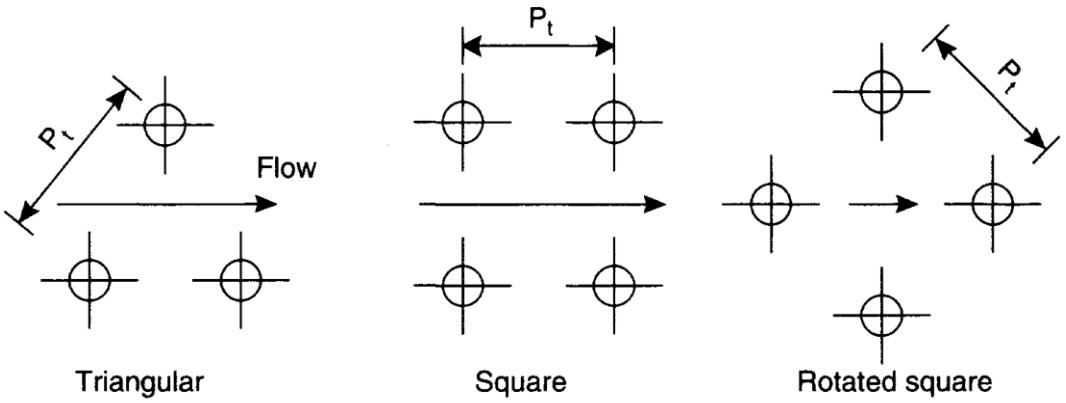

Figura 6.1: Disposição dos tubos dentro de um permutador de calor.[10]

O diâmetro do feixe não só depende apenas do número de tubos, também depende dos espaços deixados entre tubos, “pitch” (depende da disposição), e do número de passagens dos tubos. Neste projecto optou-se pela disposição triangular dos tubos dentro do permutador de calor.[10]

O diâmetro do feixe pode ser calculado através da seguinte equação[10]:

$$D_b = d_0 \left(\frac{N_t}{K_1}\right)^{1/n_1} \qquad \text{Eq. 6.3}$$

onde: N_t = número de tubos;

D_b = diâmetro do feixe, m;

d_0 = diâmetro externo, m.

As constantes utilizadas nesta equação encontram-se na Tabela IV.4 em anexo e são função do número de passagens.

Antes de determinar a área de transferência de calor, Equação 6.1, é necessário calcular a diferença média logarítmica das temperaturas, ΔT_{ml}. A ΔT_{ml} é determinada a partir da diferença de temperaturas dos fluidos à entrada e saída do permutador de calor, Equação 6.4.[10]

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{ln\left(\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}\right)} \qquad \text{Eq. 6.4}$$

onde: ΔT_{ml} = media logarítmica das temperaturas, ºC;

T_1 = temperatura do fluido á entrada, ºC;

T_2 = temperatura do fluido saída, ºC;

t_1 = temperatura entrada do tubo, ºC;

t_2 = temperatura saída do tubo, ºC.

Quando o numero de passagens é diferente de um, o fluxo no interior do pemutador deixa de ser contra-corrente "puro", sendo assim necessário corrigir a media logarítmica da temperatura pela aplicação de um factor de correcção[10]:

$$\Delta T_m = F_t \, \Delta T_{ml} \qquad \text{Eq. 6.5}$$

onde: ΔT_m = media logaritmica das temperaturas corrigida, ºC;

F_t = factor de correcção da temperatura.

O factor de correcção depende das temperaturas do fluido e dos tubos e do número de passagens e a sua forma de cálculo encontra-se no Anexo IV.

6.1.1 Condensadores

Os condensadores apresentam quatro configurações possíveis:

- Horizontal com a condensação na carcaça;
- Horizontal com condensação nos tubos;

- Vertical com a condensação na carcaça;
- Vertical com condensação nos tubos.[10]

Os condensadores mais utilizados são os horizontais com condensação na carcaça e verticais com condensação nos tubos.[10]

As etapas típicas de dimensionamento de condensadores são as seguintes:

1. Definir a taxa de transferência de calor, os caudais dos fluidos e as suas temperaturas de entrada e de saída. Neste projecto, estes dados podem ser retirados do *Aspen*. A temperatura de saída da utilidade fria do condensador foi obtida fixando o caudal desta utilidade em 10 m^3/h;
2. Obter as propriedades físicas do líquido desejado como função da temperatura (estes dados podem ser retirados do *Aspen*);
3. Escolher o tipo de permutador de calor a utilizar;
4. Assumir a 1ª estimativa para o coeficiente global de transferência de calor (a partir de valores típicos disponíveis na literatura, Tabela IV.2 no Anexo IV);
5. Calcular a diferença média das temperaturas (Equação 6.4);
6. Definir a configuração do permutador de calor (diâmetro e comprimento dos tubos e o número de passagens nos tubos). O diâmetro e/ou comprimento dos tubos é fixado de forma a garantir um regime turbulento no seu interior;
7. Calcular a área de transferência de calor associado ao U estimado (Equação 6.1);
8. Calcular os coeficientes do filme exterior, h_0, de acordo com as correlações apropriadas. Este processos é iterativo pois inclui o cálculo das propriedades físicas à temperatura da parede e esta depende dos próprios coeficientes de filme:
    a. Estimar o valor do coeficiente exterior, h_0;
    b. Calcular a temperatura da parede e estimar as propriedades físicas relevantes a esta temperatura;
    c. Calcular o novo valor do coeficiente externo, h_{01}, e compara-lo com a estimativa inicial. Repetir os passo de a. a c. até que dois valores de h_0 sejam iguais dentro de uma tolerância predefinida;
9. Calcular o valor do coeficiente de filme interno, h_i, (Equação 6.7). É necessário garantir um regime turbulento no interior dos tubos. Se para a configuração

seleccionada no passo 6 o regime não for turbulento, especificar um novo diâmetro ou comprimento dos tubos e repetir os passos 7 e 8;

10. Calcular o novo coeficiente global de transferência de calor (Equação 6.1) e comparar o seu valor com a 1ª estimativa. Se o valor obtido for diferente da estimativa inicial, este passa a ser uma nova estimativa do coeficiente global de transferência de calor e é repetido o passo 6, até que os dois valores sejam iguais dentro de uma tolerância predefinida.[10]

A área de transferência de calor determinada no passo 6 da última iteração corresponderá assim à área do permutador em questão.

Para este tipo de condensadores o calculo do coeficiente de condensação do filme externo, h_0, pelo método de Kern, é dado por[10]:

$$h_0 = 0.95 k_L \left[\frac{\rho_L(\rho_L-\rho_v)g}{\mu_L \Gamma_h}\right]^{1/3} N_r^{-1/6} \qquad \text{Eq. 6.6}$$

onde: k_L = condutividade térmica, W/mºC;

ρ_L = densidade condensado, kg/m^3;

ρ_v = densidade de vapor, kg/m^3;

μ_L = viscosidade condensado, Ns/m^2;

g = aceleração gravitacional, 9.81 m/s^2;

$\Gamma_h = W_c/LN_t$;

W_c = fluxo total de condensado;

N_t = número total de tubos;

L = comprimento dos tubos;

N_r = número médio de tubos na linha de tubos vertical.

O coeficiente de filme interno, h_i, é dado por[10]:

$$h_i = \frac{4200\ (1{,}35+0{,}02t)u_t^{0,8}}{d_i^{0,2}} \qquad \text{Eq. 6.7}$$

Ficam assim definidas as correlações necessárias para a aplicação da metodologia de cálculo de permutadores apresentada acima para os três condensadores da sequência 4. As propriedades físicas, necessárias em cada condensador de cada coluna, foram retiradas do Aspen, sendo extrapoladas para a temperatura da parede. No dimensionamento destes condensadores foram considerados os seguintes pressupostos[10]:

- Estimativa inicial de U: 850W/m^{2}ºC;

- Estimativa inicial de h_0: 932 W/m^{2o}C;
- Temperatura da utilidade fria: 25ºC;
- Caudal de utilidade fria: 10 m^3/h;
- Diâmetro mínimo dos tubos: 1″ SCH40;
- Comprimento dos tubos: 1/3 da altura da coluna;
- Número de passagens (carcaça e tubos): 1;
- Arranjo triangular, 1,25d_0.

A tabela 6.1 apresenta os resultados obtidos no dimensionamento dos condensadores necessários no projecto em estudo.

Tabela 6.1: Valores obtidos no dimensionamento dos condensadores de cada coluna.

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Comprimento dos tubos (m)	0,853	2,798	1,848
Diâmetro dos tubos (m)	0,027	0,0267	0,041
Re	1,3x10^4	6,6x10^4	8,4x10^4
U (W/m^{2o}C)	669	533	554
A	1,05	0,66	0,32
Número de tubos	12	3	2

Para o condensador das colunas 2 e 3 foi necessário alterar o comprimento dos tubos de forma a garantir um regime turbulento. O comprimento dos tubos, neste caso, é ¼ da altura da coluna.

As características apresentadas na tabela anterior definem permutadores que garantem as necessidades determinadas pela simulação de cada uma das colunas em *Aspen*. Contudo, o projecto destes permutadores deveria ser ainda optimizado com base em critérios de operação (como a perda de carga aceitável) e/ou de investimento.

As principais variáveis de optimização serão:

- O número de passagens;
- O diâmetro e/ou comprimento dos tubos;
- Caudal da utilidade fria.

6.1.2 Reebulidores

Existem vários tipos de reebulidores, o de circulação forçada, o termosifão e o "Kettle". No entanto, a escolha do tipo de reebulidor a utilizar vai depender dos seguintes factores:

- A natureza do fluido em processamento;
- A pressão de operação;
- O dimensionamento dos restantes equipamentos.[10]

Para este projecto, optou-se por utilizar o termosifão vertical, Figura 6.2. Estes reebulidores são os mais económicos na maioria das aplicações, são aplicados em misturas com baixa viscosidade e não sendo contudo aconselháveis para operações em vácuo, o que não é o caso. Apresentam como principal desvantagens necessitar que a base da coluna esteja elevada para fornecer a pressão hidrostática necessária ao efeito termosifão, pois pode aumentar o custo do suporte da coluna.[10]

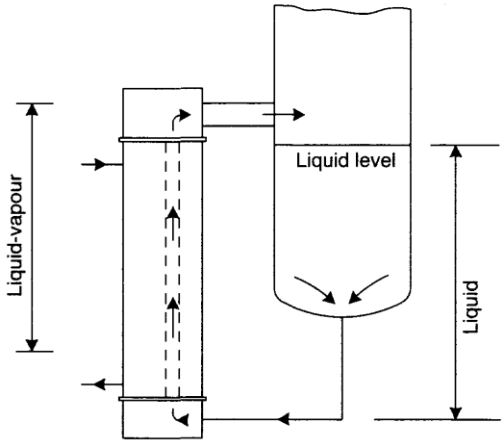

Figura 6.2: Reebulidor termosifão vertical.[10]

Para o projecto dos reebulidores há que considerar dois conceitos adicionais: o fluxo de calor máximo e a taxa de recirculação.

Num processo de vaporização podem ocorrer instabilidades quando o fluxo de calor é elevado. Para fluxos de calor superiores ao denominado fluxo crítico ou fluxo máximo, verifica-se uma redução significativa dos coeficientes de filme devido à formação de um filme de gás na superfície de transferência de calor. Em casos extremos, este filme pode levar à destruição da própria superfície metálica. Por este motivo é importante definir o fluxo de calor máximo.[10]

O fluxo de calor é definido por[10]:

$$q = U\,\Delta T_{mL} \qquad \text{Eq. 6.8}$$

A razão de recirculação é outro parâmetro a ter em conta no dimensionamento dos reebulidores. A razão de refluxo é a razão entre o caudal de líquido e o caudal de vapor da mistura vaporizada.

A circulação da mistura num reebulidor do tipo termosifão é garantida apenas por diferenças de densidade. A força impulsionadora, para a recirculação do fluido, é a diferença da densidade do líquido e a da mistura. A mistura irá circular no interior dos tubos do reebulidor a uma velocidade tal de forma a que as perdas de pressão no sistema são equilibradas pela pressão hidrostática disponível. No caso dos reebulidores tipo termosifão a razão de recirculação não deve ser inferior a 3.[10]

O cálculo das perdas de carga associada à recirculação da mistura é assim de extrema importância.

O projecto de reebulidores do tipo termosifão é mais complexo que o projecto dos condensadores. Contudo, é possível simplificar o dimensionamento de reebulidores, para misturas, se tivermos em conta os pressupostos abaixo:

- Para estimar a área de transferência de calor utiliza-se o fluxo de calor máximo permitido, no caso dos reebulidores verticais é de 37900W/m^2;
- A razão de recirculação não deve ser inferior a 3;
- No caso do comprimento, este varia de 1,83m, para operações em vácuo, a 3,66, para operações à pressão;
- São também preferidos diâmetros de tubo de 1″;
- A estimativa da queda de pressão total tem que ser inferior à disponível na cabeça do reebulidor (força impulsionadora), de forma a permitir a queda de pressão através dos tubos considerados.[10]

<u>Determinação da força impulsionadora disponível e da perda de carga total</u>

A força impulsionadora corresponde à coluna de líquido que antecede a alimentação do reebulidor e é determinada a partir da seguinte equação[10]:

$$\Delta P_a = \rho_L g L_t \qquad \text{Eq. 6.9}$$

onde, ρ_L= densidade do líquido, kg/m^3;

g = aceleração gravitacional, 9.81 m/s^2;

L_t = comprimento dos tubos, m.

As perdas de carga resultantes da circulação da mistura resultam da perda de carga por atrito associada à circulação da mistura sendo necessário vencer ainda a coluna de líquido do próprio reebulidor. A perda de carga total resulta assim da soma destes dois termos.

As perdas de carga pelo escoamento da mistura são dadas pela seguinte equação[10]:

$$\Delta P_f = 8\, j_f \left(\frac{L'}{d_{in}}\right) \frac{\rho\, u_t^2}{2} \qquad \text{Eq. 6.10}$$

onde, j_f = factor de fricção, retirado do grafico representado na Figura IV.2, do Anexo IV;

L' = Comprimento linear, m;

d_{in} = diametro interno, m;

ρ = densidade, kg/m^3;

u_t = velocidade do fluido, m/s.

a velocidade do fluido é dada por[10]:

$$u_t = \frac{G}{\rho} \qquad \text{Eq. 6.11}$$

onde, G = fluxo massico, kg/m^{2}s.

Considera-se que a perda de carga ao longo dos tubos do permutador é linear sendo esta calculada pela média aritemética da perda de carga calculada nas condições de entrada e saída do reebulidor, ou seja, considerando as propriedades físicas do líquido para as condições de entrada e as propriedades físicas da mistura para as condições de saída.[10]

A densidade da mistura nas condições de saída do permutador dependem da taxa de recirculação especificada e é dada pela equação seguinte[10]:

$$\rho_{mist} = \frac{100}{\frac{\%V}{\rho_v} + \frac{\%L}{\rho_L}} \qquad \text{Eq. 6.12}$$

onde, %V, %L = percentagem de vapor ou líquido presentes na mistura de dependem da razão de recirculação selecionada.

A pressão estática determina-se a partir da seguinte equação[10]:

$$\Delta P_S = \frac{g\, L_t}{(\upsilon_L - \upsilon_{mis})} \ln\left(\frac{\upsilon_{mis}}{\upsilon_L}\right) \qquad \text{Eq. 6.13}$$

onde, υ_L e υ_{mist} = inverso da densidade do liquido e da mistura.

A razão de recirculação é especificada de forma a que a força impulsionadora disponível permita vencer as perdas de carga por atrito e a pressão estática relativa à coluna de líquido da mistura.

Determinação dos coeficientes de filme

O coeficiente de filme, h_i, assumindo um regime turbulento, é dado por[10]:

$$Nu = j_h \, Re \, Pr^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14} \qquad \text{Eq. 6.14}$$

onde: Nu = número de Nusselt,

Re = número de Reynolds,

Pr = número de Prandtl,

μ = viscosidade do fluido, Ns/m^2.

Esta equação pode ser rearranjada para[10]:

$$\frac{h_i \, d_i}{k_f} = j_h \, Re \, Pr^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14} \qquad \text{Eq. 6.15}$$

Tendo em conta os pressupostos anteriores e as correlações definidas anteriormente é agora definido mais em detalhe a metodologia de cálculo deste tipo de permutadores.

1. Definir a taxa de transferência de calor, os caudais dos fluidos e as suas temperaturas de entrada e de saída. Neste projecto, estes dados podem ser retirados do *Aspen*;
2. Obter as propriedades físicas do líquido desejado como função da temperatura (estes dados podem ser retirados do *Aspen*);
3. Calcular a diferença média das temperaturas (Equação 6.4);
4. Definir a configuração do permutador de calor (diâmetro e comprimento dos tubos e o número de passagens nos tubos). O diâmetro e/ou comprimento dos tubos é fixado de acordo com os pressupostos indicados acima;
5. Especificar uma relação L/V (superior a 3);
6. Assumir a 1ª estimativa para o coeficiente global de transferência de calor (a partir de valores típicos disponíveis na literatura, Tabela IV.1 no anexo IV);
7. Calcular a área de transferência de calor associada ao U estimado (Equação 6.1);
8. Calcular a força impulsionadora disponível para a recirculação da mistura (Equação 6.9);
9. Calcular a perda de carga total do sistema, ΔP_f (Equação 6.10) + ΔP_S (Equação 6.13);

10. Se a força impulsionadora é inferior à $\Delta P_f + \Delta P_S$, especificar novo comprimento dos tubos e repetir os passos 5 a 10;
11. Calcular o coeficiente de filme interno, h_i (Equação 6.15) É necessário garantir um regime turbulento no interior dos tubos. Se para a relação L/V seleccionada no passo 5 o regime não for turbulento, especificar nova relação L/V e repetir os passos 6 a 10.
12. Calcular o novo coeficiente global de transferência de calor[1] (Equação 6.1) e comparar o seu valor com a 1ª estimativa. Se o valor obtido for diferente da estimativa inicial, este passa a ser a nova estimativa do coeficiente global de transferência de calor e é repetido o passo 6 até que os dois valores sejam iguais dentro de uma tolerância predefinida;
13. Calcular o fluxo de calor. Se este fluxo de calor for superior ao fluxo de calor crítico, especificar um diâmetro dos tubos superior ou uma temperatura da utilidade quente inferior. Repetir os passos de 5 a 12. [10]

A área de transferência de calor determinada no passo 6 da última iteração corresponderá assim à área do permutador em questão.

Na tabela 6.2 apresentam-se os resultados da aplicação da metodologia acima para os reebulidores das três colunas da sequência 4.

Tabela 6.2: Valores obtidos no dimensionamento dos reebulidores.

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna3
d_0 (m)	0,0335	0,0355	0,0335
L (m)	3,7	2,5	3,7
L/V	10	20	40
$A_{máx}$ (m^2)	2,93	2,04	1,45
Número de passagens	1	1	1
ΔP_f (Pa)	8240	5928	14371
ΔP_a (Pa)	31221	21419	29658
Fluxo crítico (W/m^2)		37900	
A_{min} (m^2)	1,96	1,19	0,43
Fluxo (W/m^2)	25441	22169	11293

Os resultados mostrados na tabela acima foram obtidos assumindo a configuração recomendada para reebulidores do tipo termosifão vertical (tubos com um diâmetro de 1″ e

[1] Dado que do lado exterior dos tubos temos a condensação de vapor de água, o coeficiente de filme externo será estimado de acordo com os valores típicos da literatura.

comprimentos de 3.7m) tendo sido ajustado, a cada caso a taxa de recirculação de forma a conseguir um regime turbulento no interior dos tubos.

Como se pode verificar, a taxa de recirculação para qualquer um dos reebulidores é muito superior à recomendada. Com efeito, o regime turbulento no interior dos tubos apenas foi conseguido a partir das taxas de recirculação apresentadas. Para o caso particular do reebulidor da coluna 3 e, devido ao caudal reduzido de resíduo, é necessário garantir taxas de recirculação próximas de 40 indicando que para este caso, um termosifão poderá não ser o permutador ideal.

Como se pode ver, para todos os reebulidores o fluxo de calor é ainda muito inferior ao fluxo crítico indicando que será possível optimizar ainda os custos de investimento pela redução da área de transferência de calor. Com efeito, é possível reduzir a área de transferência de calor fazendo variar a razão de recirculação. Dado que o aumento da razão de recirculação não implica aumento nos custos de operação, desde que sejam garantidas perdas de carga totais inferiores à força impulsionadora disponível, o aumento da recirculação conduz à diminuição da área de transferência de calor. No entanto, é necessário ter em conta que, para um determinado perfil de temperaturas, há um valor mínimo para a área de transferência de calor, definido pelo coeficiente fluxo crítico. Com efeito, de acordo com a Equação 6.8, para um determinado perfil de temperatura é possível determinar o coeficiente global de transferência de calor máximo, através do fluxo crítico de calor (Equação 6.16), que não pode excedido.

$$U_{máx} = \frac{q_{cr}}{\Delta T_{mL}} \qquad \text{Eq. 6.16}$$

De acordo com a Equação 6.1, o $U_{máx}$ está relacionado com uma área mínima:

$$A_{min} = \frac{Q}{q_{cr}} \qquad \text{Eq. 6.17}$$

Como se pode verificar na Tabela 6.2, para qualquer um dos três reebulidores, a área de transferência de calor determinada é muito superior à respectiva área mínima. Um dos processos de optimização do projecto destes permutadores será assim determinar, para uma dada configuração do reebulidor, a relação da área com a taxa de recirculação e fixar a taxa de recirculação de operação com base nesta curva.

Capítulo 7 – Estudo da Viabilidade Económica do Projecto

O objectivo da análise da viabilidade económica de um projecto é verificar se este é ou não é rentável. Na análise económica são necessárias estimativas dos custos de investimento e dos custos de produção.

O custo de investimento é o custo necessário para que a instalação esteja pronta para iniciar o funcionamento da unidade. Os custos de investimento subdividem-se em: custo de capital fixo (CCF) e custo de capital circulante (CCC). Os custo de capital fixo estão distribuídos em: directos que são os custos do equipamento (CE), os custos de montagem do equipamento, os custos de tubagem e isolamento, os custos de electricidade, os custos de instrumentação e controlo, os custo de edifícios e os custo de terrenos; e os indirectos que são os custo do projecto de engenharia, os custos de despesas legais e os custos de imprevistos. Neste projecto o capital circundante é nulo, pois a matéria-prima é o efluente da produção de anilina, ou seja, as matérias-primas não são compradas nem é necessária a sua armazenagem.[25]

Os custos directos do capital fixo são determinados em função dos custos do equipamento.[25] Na tabela seguinte, Tabela 7.1, são apresentados os factores utilizados na determinação dos custos de montagem do equipamento, os custos de tubagem e isolamento, os custos de electricidade, os custos de instrumentação e controlo, os custos de edifícios e os custos de terrenos.

Tabela 7.1: Factores utilizados nos cálculos dos custos fixos de capital directos.

Custos de capital fixos directos	Factores
Montagem equipamento	**20% CE**
Tubagem e isolamento	**20% CE**
Electricidade	**10% CE**
Instrumentação e controlo	**15% CE**
Edifícios	**10% CE**
Terrenos	**4% CE**

Por outro lado os custos fixos de capital indirectos são determinados em função dos custos de equipamento e em função dos custos fixos de capital.[25] Na tabela seguinte,

Tabela 7.2, são apresentados os factores utilizados na determinação os custo do projecto de engenharia, os custos de despesas legais e os custos de imprevistos.

Tabela 7.2: Factores utilizados nos cálculos dos custos fixos de capital indirectos.

Custos de capital fixos indirectos	Factores
Projecto de engenharia	**5% CE**
Despesas legais	**10% CCF**
Imprevistos	**5% CCF**

Os custos de fabrico são os custos necessários para que a unidade produza o produto desejado. Os custos de fabrico, por sua vez, estão subdivididos em: custos de produção (CP) e custos de despesas gerais. Neste projecto os custos de despesas gerais são considerados nulos. Por sua vez, os custos de produção em divididos em: custos fixos, custos directos e custos indirectos. Os custos directos estão associados às matérias-primas, à manutenção e às utilidades. Como neste projecto a matéria-prima é um efluente da produção de anilina, considera-se que o seu custo é nulo. Os custos indirectos estão associados aos custos em laboratórios e serviços indirectos. Os custos fixos estão associados às amortizações, à mão de obra (CMO), aos seguros e às rendas.[25]

Como no caso dos custos de investimento, nos custos de fabrico também à custos que dependem de outros custos. Os custos fixos são determinados em função dos custos de produção e dos custos capital fixo.[25] Na tabela seguinte, Tabela 7.3, são apresentados os factores utilizados na determinação dos custos de mão-de-obra, dos seguros e das rendas.

Tabela 7.3: Factores utilizados nos cálculos dos custos de produção fixos.

Custos de produção fixos	Factores
Mão-de-obra	**10% CP**
Seguros	**1%CCF**
Rendas	**1% CCF**

Os custos de produção indirectos são determinados em função dos custos de mão-de-obra.[25] Na tabela seguinte, Tabela 7.4, são apresentados os factores utilizados na determinação dos custos de laboratórios e dos serviços indirectos.

Tabela 7.4: Factores utilizados nos cálculos dos custos de produção indirectos.

Custos de produção indirectos	Factores
Laboratórios	**75% CMO**
Serviços directos	**20% CMO**

Outro parâmetro importante na viabilidade económica são as vendas. Neste projecto estima-se uma produção anual de 189 ton de CHA e 314 ton de CHOL. Assume-se que o preço do CHA é de 1000€/ton e o do CHOL é de 900€/ton, perfazendo no total um valor de vendas por ano de 470737€.

Depois de realizadas as estimativas para os custos de investimento e para os custos de fabrico, é realizada a análise da viabilidade económica do projecto. Existem vários critérios de avaliação económica do projecto, sendo os mais comuns:

- Período de Recuperação do Investimento;
- Valor actual Liquido (VAL);
- Taxa Interna de Rentabilidade (TIR).[11]

"O período de recuperação é o espaço de tempo que o somatório dos Cash Flows leva a igualar o investimento inicial."[11] O projecto tem uma viabilidade maior quanto menor for esse espaço de tempo. Este método e simples de aplicar no entanto habitualmente não considera o valor da diferença do dinheiro ao longo do tempo.[11]

O Valor Actual Líquido, VAL, é o somatório dos Cash-Flows actualizados com base numa determinada taxa de desconto, a definir normalmente pelo departamento financeiro. Este é considerado um dos métodos mais rigoroso, assim como a TIR, pois considera o valor da diferença do dinheiro ao longo do tempo. O VAL é considerado o critério mais vantajoso.[11]

$$VAL = -C_0 + \frac{C_1}{1+T} + \cdots + \frac{C_n}{(1+T)^n} \qquad \text{Eq. 7.1}$$

"A Taxa Interna de Rentabilidade, TIR, é a taxa de actualização que iguala o Valor Liquido a 0."[11] a forma geral da equação é:

$$-C_0 + \frac{C_1}{1+TIR} + \cdots + \frac{C_n}{(1+TIR)^n} = 0 \qquad \text{Eq. 7.2}$$

Para o projecto em causa foram definidos os seguintes pressuposts:

- A taxa de desconto: 10%
- A duração do projecto: 5 anos

e obtiveram-se os seguintes valores:

Tabela 7.5: Custo do investimento.

Custo de Investimento (€)			**451485**
Custo Capital Fixo (€)			
Custos Directos (€)		Custos Indirectos (€)	
Equipamento (€)	230650	Projecto (€)	11532
Montagem (€)	46130		
Tubagem e isolamento (€)	46130	Despesas legais (€)	4514
Electricidade (€)	23065		
Instrumentação e controlo (€)	34597	Imprevistos (€)	22574
Edifícios (€)	23065		
Terreno (€)	9226		

Tabela 7.6: Custos de Fabrico.

Custos de Fabrico (€)					**174135**
Custos de Produção (€)					174135
Directos		Indirectos		Fixos	
Manutenção (€)	22574	Laboratórios (€)	4353	Amortizações (€)	74495
				Mão-de-obra (€)	17413
Utilidades (€)	34080	Serviços indirectos (€)	13060	Seguros (€)	4515
				Rendas (€)	4515

Os resultados obtidos para o período de recuperação do investimento, do VAL e da TIR estão registados na Tabela 7.7. O valor obtido para a TIR é determinado a partir da representação gráfica da variação do VAL com o valor da taxa de desconto.

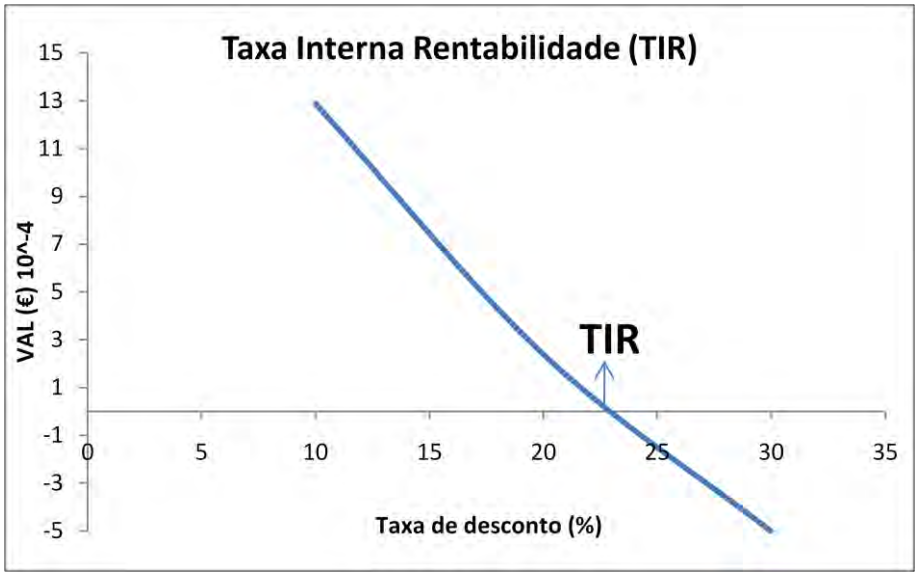

Figura 7.1: Representação gráfica da variação do VAL com a taxa de desconto.

Tabela 7.7: Valores obtidos para a análise da viabilidade económica.

Análise da Viabilidade Económica		
Período de recuperação do capital (ano)	Com actualização	3,9
	Sem actualização	3,1
VAL (€)		128853
TIR (%)		23

Dado que o VAL é superior a zero e a TIR é superior, e muito, ao valor da taxa de desconto seleccionada para este projecto, a recuperação do CHA e do CHOL deste efluente e posterior comercialização é assim economicamente viável.

Conclusões

Do levantamento bibliográfico relativo a diferentes processos de separação conclui-se que nenhum dos processos analisados permitem, por si só, substituir o processo de destilação para a separação da mistura em estudo. Parece haver, contudo, vantagens em associar o processo de destilação a tecnologias de separação por membrana, especialmente se estas permitirem a desidratação prévia do efluente bruto. É assim aconselhado um estudo mais detalhado de técnicas como a osmose reversa ou a pervaporação com o objectivo de conhecer a viabilidade técnica destes processos para a separação em causa.

Relativamente ao processo de destilação, foi possível identificar cinco possíveis sequências de separação dos seus componentes. De entre estas, foram seleccionadas três, onde o estudo detalhado foi realizado, nomeadamente às sequências identificadas como 2, 4 e 5.

A aplicação dos métodos rigorosos do *Aspen*, através do método RADFRAC, permitiu, para cada sequência a construção de uma função objectivo de custo. Da análise das funções de custo, conclui-se que a sequência que permite a recuperação da ciclohexilamina e ciclohexanol do efluente com os menores custos é a sequência 4, na qual a água e o benzeno são eliminados na primeira coluna, e a ciclohexilamina separada do ciclohexanol na última. Na coluna intermédia é recuperada, como resíduo a anilina presente no efluente. Foi ainda desenvolvido um diagrama de Processo e Instrumentação simplificado, P&I, para a sequência ideal, definida acima assim como o dimensionamento dos respectivos permutadores de calor. Neste projecto o tipo de condensadores considerados foram condensadores horizontais de carcaça e tubos com condensação na carcaça, e para os reebulidores foram considerados reebulidores do tipo termosifão vertical.

Por fim foi realizada a análise da viabilidade económica da implementação da sequência ideal, concluindo-se que com um VAL de 128853€, ao fim de 5 anos, e uma TIR de 23%, a separação da ciclohexilamina e do ciclohexanol deste efluente e a sua posterior comercialização é rentável. O tempo de recuperação do capital sem consideração da actualização monetária é de 3,1 anos e com esta, é de 3,9 anos.

Bibliografia

1. CUF, *http://www.quimigal.com*. 2006.
2. Inc., A.H., *http://chemicalland21.com/*. 2000.
3. Ho, W.S.W., Sircar, Kamalesh K., *Membrane handbook*. 2001,Boston (MA): Kluwer Academic Publishers.
4. Smith, R., *Chemical process – Desing and Integration* 2005: Wiley.
5. Smallwood, I., *Solvent Recovery Handbook*, ed. 2. 2002: Blackwell Publishing.
6. Stichlmair, J.G. and J.R. Fair, *Distillation – Principles and Practice* 1998, Nova Iorque Wiley-VCH.
7. Group, T.D. *http://www.distillationgroup.com/distill.htm*. 2001 11 de Janeiro de 2002.
8. Tham, M.T. *http://lorien.ncl.ac.uk/ming/distil/distil0.htm. 1997*
9. Elliot, J.R and C.T. Lira, *Introductory Chemical Engineering Thermodynamics*. 1ª ed. 1999: Prentice Hall PTR.
10. Sinnott, R.K., *Coulson & Richardson's Chemical Engineering - Chemical Engineering Design*. 3ª ed. Vol. VI. 1999, Burlington: Butterworth-Heinemann.
11. Esperança J.P., Programa Para Executivos – Análise das Decisões de Investimento, Pós-Graduação na Faculdade de Ciências Económicas e Empresariais.
12. Amorim M.T., *Processos de Separação com Membranas na Reciclagem e Tratamento de Efluentes na Industria Textil*, [consulta 11 Novembro 2009]; Disponível em : http://repositorium.sdum.uminho.pt/handle/1822/2269.
13. Seader, J.D., *Separation Process Principles* 1998, New York John Wiler.
14. Li, K., *Ceramic Membranes for Separartion and Reaction* 2007, Chichester: John Wiley & Sons.
15. Rautenbach, R. e Albert, R., *Membrane Processes* 1989, Chichester: John Wiley.
16. Assis, A. R., Bizzo, H.R., Mata, V.M. e Cabral, L.M.C., *Recuperação e concentração de componentes do aroma de caju por pervaporação*. [consulta em: 11 de Novembro de 2009]; Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S010120612007000200024.
17. Malesh Kumar S, *Pervaporation Overview*. [consulta em: 17 de Dezembro 2008]; Disponível em: http://www.cheresources.com/indexzz.shtml.
18. Smallwood, I., *Solvente Recovery Handbook*. 2ª ed. 2002, Oxford: Blacwell Publishing.
19. Rautenbach, R. e Albrecht, R., *Membrane Processes* 1989, Chichester: John Wiley.
20. Neves, F. J. M. (2007), *Modelling and Optimization of Large-Scale Processes-Aplication to the Liquid-Phase Aniline Production*, Doutoramento do Departamento de Engenharia Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra.
21. Tourton, R. et all., *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* 1998, New Jersey: Pretice Hall.
22. Wills, M. J., *Selecting a Distillation Column Control Strategy*, University of Newcastle 2000.
23. The Ecosse IGDS Control Hyper Course, http://www.see.ed.ac.uk/~jwp/control06/controlcourse/restricted/course/fourth/course/module3-1.html. [consulta em 20 de Outubro de 2009].
24. Kern, D.Q., *Process Heat Transfer* 1965, McGraw-Hill Book Company.

25. Pereira, S., *Dimensionamento de uma Unidade Fabril para a Produção de Fermento de Padeiro a Partir de Melaços*, Projecto no âmbito da cadeira de Dissertação/Projecto do 5ºAno curso de Engenharia Química da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, 1992.
26. Ferreira, F. C., Han, S.J., and Livingstone A.G., *Recovery of Aniline from Aqueous Solution Using the Membrane Aromatic Recovery System*, Industrial & Engineering Chemistry Research, 2002.
27. *Nist Livro de Química na Web*. [consulta: 10 outubro 2008]; Disponivel em: http://webbook.nist.gov/chemisttry/
28. Marshal, R., *Economic Indicators, in Chemical Engeneering* 2009, New York: Access Intelligence.

Nomenclatura

F_i	Caudal de entrada na coluna i	
L_i	Caudal de líquido à saída da coluna i	
V_i	Caudal de vapor à saída da coluna i	
i	Número da coluna, i = 1,2 ou 3	
z_i^j	Composição do componente j na corrente de entrada da coluna i	
y_i^j	Composição do componente j na corrente de vapor da coluna i	
x_i^j	Composição do componente na corrente de líquido da coluna i	
γ^∞	Coeficiente de actividade do solvente numa diluição infinita em água	
C_{CU}^k	Custo de operação dos condensadores	k€/ano
C_{HU}^k	Custo de operação dos reebulidores	k€/ano
C_C^k		
C_R^k	Custos de aquisição da coluna de destilação anualizados	k€/ano
C_{SHE}^k		
C_{INT}^k		
G_{CIL}^i	Factor que varia com o tipo de equipamento	
A_C	Área do condensador	m^2
A_R	Área do reebulidor	m^2
$T_{C,out}$	Temperatura de saída	ºC
$T_{C,int}$	Temperatura de entrada	ºC
χ^x	Variável auxiliar	
ϑ_v	Velocidade do gás	m/s
ΔT_C^k	Variação da temperatura da coluna	ºC
Q_C^k	Calor transferido do condensador	W
Q_R^k	Calor transferido do reebulidor	W
A	Parâmetro do tamanho do equipamento	m
D	Diâmetro do decantador	m
Q_{mist}	Caudal volumétrico	m^3/s
u_c	Velocidade superficial da fase contínua	m/s
L	Comprimento do decantador	m
C_{DEC}^i	Custo do decantador no ano i	k€
I_i	Índice de actualização do ano i	
Q	Calor transferido por unidade de tempo	W
U	Coeficiente global de transferência de calor	$W/m^2ºC$
A	Área de transferência	m^2
ΔT_{mL}	Media logarítmica das temperaturas	ºC
U_0	Coeficiente global com base na área externa do tubo	$W/m^2ºC$
h_0	Coeficiente da película do fluído	$W/m^2ºC$
h_i	Coeficiente do filme líquido	$W/m^2ºC$
h_{0d}	Coeficiente de sujidade do lado do líquido	$W/m^2ºC$
h_{id}	Coeficiente de sujidade do lado dos tubos	$W/m^2ºC$
k_w	Condutividade térmica do material da parede do tubo	$W/m^2ºC$
d_i	Diâmetro interno dos tubos	m

d_0	Diâmetro externo dos tubos	m
N_t	Número de tubos	
D_b	Diâmetro do feixe	m
T_1	Temperatura do fluído à entrada	ºC
T_2	Temperatura do fluído à saída	ºC
t_1	Temperatura à entrada do tubo	ºC
t_2	Temperatura à saída do tubo	ºC
F_t	Factor de correcção da temperatura	
k_L	Condutividade térmica	W/mºC
ρ_L	Densidade do condensado	kg/m^3
ρ_v	Densidade do vapor	kg/m^3
μ_L	Viscosidade do condensado	Ns/m^2
g	Aceleração gravitacional	m/s
W_c	Fluxo total de condensado	
N_r	Número de tubos na linha de tubos vertical	
L	Comprimento linear	m
d_{in}	Diâmetro interno	m
G	Fluxo mássico	kg/m^2s
Nu	Número de Nusselt	
Re	Número de Reynolds	
Pr	Número de Prandtl	

Lista de abreviaturas

BZ	Benzeno
CHA	Cicloxexilamina
CHOL	Ciclohexanol
ANL	Anilina
H_2O	Água
VAL	Valor Actual Líquido
TIR	Taxa Interna de Rentabilidade

Anexos

Anexo I – Propriedades físicas e químicas dos compostos da mistura

Tabela I.1: Propriedades físicas e químicas dos componentes da mistura em estudo.

Componente	**Água**		**Benzeno**		**Ciclohexanol**		**Cicloxexilamina**		**Anilina**	
Notação química	H_2O		C_6H_6		$C_6H_{12}O$		$C_6H_{13}N$		C_6H_7N	
Peso molecular (kg/mol)	18,02		78,11		100,16		99,17		93,13	
Densidade a 20 °C (kg/m^3)	998,21		878,9		962,4		819,1		1021,7	
Calor especifico, Cp (kJ/kg.ºC)	Cp	T (ºC)	Cp	T (ºC)	Cp	T (ºC)	Cp	T (ºC)	Cp	T (ºC)
Liquido	4,1813	25	1,742	25	2,079	26	-	-	2,061	25
Gás	2,0437	110	1,055	25	1,325	25	-	-		
Viscosidade dinâmica (m.Pa.s) G: vapor a 200 ºC L: líquido a 25 °C	L	G	L	G	L	G	L	G	L	G
	0,88988	1,62E-02	0,604	1,15E-02	57,5	8,61E-03	1,94	9,92E-03	3,85	9,42E-03
Ponto de fusão (ºC)	0		5,5		25,4		-17,7		-6,0	
Condutividade térmica (W/m.K)	0,607		0,1411		0,134		0,139		0,15	
Calor latente de vaporização (kJ/kg)	419,06		393,292		453,674		364,425		455,707	
Ponto ebulição (ºC)	100,00		80,10		160,80		134,50		184,13	
Constantes de Antoine Pressão, P em Torr Temperatura, T em ºC log(P)=A - B / (C + T)	A= 4,65430 *		A= 4,01814**		A= 3,08077		A= 4,06885		A= 4,34541	
	B= 1435,264		B= 1203,835		B= 777,363		B= 1380,225		B= 1661,858	
	C= -64,848		C= -53,226		C= -182,037		C= -67,285		C= -74,048	

Anexo II – Método UNIFAC

A abordagem básica é a generalização do coeficiente de actividade residual.

Para perceber o desenvolvimento da técnica preditiva, imagine as interacções de um grupo CH_3 numa mistura de isopropanol (1) e componente (2).

O isopropanol consiste em dois grupos CH_3; um grupo CH e um grupo OH. Portanto, na mistura, um grupo CH_3 irá encontrar os três grupos do isopropanol e os grupos do componente (2), dependendo as energias de interacção do número de cada tipo de grupo disponível na solução. Devido a isso a energia de interacção dos grupos CH_3 pode ser calculada relativamente a uma solução hipotética de 100% de grupos CH_3. A mistura pode ser aproximada a uma solução de grupos (em vez de uma solução de moléculas), e as energias de interacção podem ser integradas com respeito à temperatura para chegar ao potencial químico.

Devido a isso, é possível calcular $\frac{\mu_{CH_3}^{SOG} - \mu_{CH_3}^{o}}{RT} = \ln\left(\Gamma_{CH_3}\right)$, onde $\mu_{CH_3}^{o}$ é o potencial químico numa solução hipotética de 100% de grupos CH_3 e Γ_{CH_3} é o coeficiente de actividade do CH_3 na solução de grupos. O potencial químico dos grupos CH_3 em isopropanol puro (1), $\mu_{CH_3}^{(1)}$, irá diferir do $\mu_{CH_3}^{o}$ porque até no isopropanol puro o CH_3 irá encontrar uma mistura de grupos (CH_3, CH e OH), e por isso o coeficiente de actividade dos grupos CH_3 no isopropanol puro, $\Gamma_{CH_3}^{(1)}$, não é unitário. O índice (1) indica componente puro.

A diferença que é desejada é o efeito da mistura dos grupos CH_3 em isopropanol com o componente (2), relativamente ao isopropanol puro, ou seja, $\frac{\mu_{CH_3}^{SOG} - \mu_{CH_3}^{(1)}}{RT} = \frac{\mu_{CH_3}^{SOG} - \mu_{CH_3}^{o}}{RT} - \frac{\mu_{CH_3}^{(1)} - \mu_{CH_3}^{o}}{RT} = \ln\left(\Gamma_{CH_3}\right) - \ln\left(\Gamma_{CH_3}^{(1)}\right)$[14].

Se o potencial químico de uma molécula consiste na soma das interacções dos grupos, $\mu_1 = 2\mu_{CH_3}^{SOG} + \mu_{CH}^{SOG} + \mu_{OH}^{SOG}$ e $\mu_1^{o} = 2\mu_{CH_3}^{(1)} + \mu_{CH}^{(1)} + \mu_{OH}^{(1)}$, então chegamos ao importante resultado que é utilizado no UNIFAC,

$$\ln\left(\gamma_1^{RES}\right) = \frac{\mu_1 - \mu_1^{o}}{RT} = \sum_m \nu_m^{(1)}\left[\ln\Gamma_m - \ln\Gamma_m^{(1)}\right]$$

onde o somatório é para todos os grupos funcionais na molécula (1) e $\nu_m^{(1)}$ é o numero de ocorrências do grupo m na molécula.

A fórmula do coeficiente de actividade para qualquer outro componente molecular pode ser encontrada pela substituição para (1), na equação anterior.

Note que, Γ_m é calculado na solução de grupos para todas as moléculas na mistura, enquanto $\Gamma_m^{(1)}$ é calculado, na mesma solução, apenas para o componente (1). O valor de $\ln \Gamma_m$ é calculado pela generalização da expressão UNIQUAC e das equações adjacentes para $\ln \gamma_m^{RES}$, obtendo-se as seguintes equações, onde $\nu_k^{(i)}$ é o número de grupos do tipo k na molécula i[14].

$$\ln \Gamma_m = Q_m \left[1 - \ln \sum_i \Theta_i \Psi_{im} - \sum_j \frac{\Theta_j \Psi_{mj}}{\sum_i \Theta_i \Psi_{ij}} \right]$$

$$\Theta_j \equiv \frac{X_j Q_j}{\sum_i X_i Q_i} \qquad \Psi_{mj} = \exp\left(\frac{-a_{mj}}{T} \right) \qquad X_j = \frac{\sum_{moléculas\,i} \nu_j^{(i)} x_i}{\sum_{moléculas} \sum_{grupos\,k} \nu_k^{(i)} x_i}$$

Tabela II.1: Energias de interacção, do equilíbrio liquido-vapor, para a equação UNIFAC, em Kelvin.[9]

Grupo principal, i	CH_2 j=1	ACH j=3	$ACCH_2$ j=4	OH j=5	CH_3OH j=6	H_2O j=7	ACOH j=8	CH_2CO j=9	CHO j=10	COOH j=20
1,CH_2	---	61,13	76,5	986,5	697,2	1318	1333	476,4	677	663,5
3,ACH	-11,12	---	167	636,1	637,3	903,8	1329	25,77	347,3	537,4
4,$ACCH_2$	-69,7	-146,8	---	803,2	603,3	5695	884,9	-52,1	586,8	872,3
5,OH	156,4	89,6	25,82	---	-137,1	353,5	-259,7	84	-203,6	199
6,CH_3OH	16,51	-50	-44,5	249,1	---	-181	-101,7	23,39	306,4	-202,0
7,H_2O	300	362,3	377,6	-229,1	289,6	---	324,5	-195,4	-116,0	-14,09
8,ACOH	275,8	25,34	244,2	-451,6	-265,2	-601,8	---	-356,1	-271,1	408,9
9,CH_2CO	26,76	140,1	365,8	164,5	108,7	472,5	-133,1	---	-37,36	669,4
10,CHO	505,7	23,39	106,0	529	-340,2	480,8	-155,6	128	---	497,5
20,COOH	315,3	62,32	89,86	-151	339,8	-66,17	-11,00	-297,8	-165,5	---

Tabela II.2: Comparação das variáveis de grupo e moleculares para o UNIFAC.[9]

	Variável de grupo	Variável molecular
Volume	R	R
Área superficial	Q	Q
Coeficiente de actividade	Γ	γ
Fracção da superfície	Θ	θ
Variável de energia	Ψ_{ij}	τ_{ij}
Parâmetro de energia	a_{ij}	a_{ij}
Fracção molar	X	x

Anexo III – Resultados do Estudo Detalhado das Sequências 2, 4 e 5

Tabela III.1: Resultados dos balanços de massa simplificados para a sequência 2.

Caudais totais (kg/h)								
F_1	**L_1**	**V_1**	**F_2**	**L_2**	**V_2**	**F_3**	**L_3**	**V_3**
500	290	210	210	25	185	25	5	20

Tabela III.2: Resultados dos balanços de massa simplificados para a sequência 4.

Caudais totais (kg/h)								
F_1	**L_1**	**V_1**	**F_2**	**L_2**	**V_2**	**F_3**	**L_3**	**V_3**
500	355	145	355	290	65	65	25	40

Tabela III.3: Resultados dos balanços de massa simplificados para a sequência 5.

Caudais totais (kg/h)								
F_1	**L_1**	**V_1**	**F_2**	**L_2**	**V_2**	**F_3**	**L_3**	**V_3**
500	355	145	355	315	40	315	290	25

Tabela III.4: Resultados do perfil de concentrações obtido pelo método rigoroso na sequência 2, sequência com o decantador.

	Coluna 1						Coluna 2				Coluna 3			
	F		**D_1**		**B_1**		**D_2**		**B_2**		**D_3**		**B_3**	
	x_i	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**
Benzeno	$2{,}50x10^{-1}$	125,00	$5{,}98x10^{-1}$	125,0	$6{,}17x10^{-8}$	0,00	$6{,}76x10^{-1}$	125,00	$4{,}04x10^{-34}$	0,00	$9{,}67x10^{-1}$	124,74	$6{,}34x10^{-3}$	0,24
Anilina	$5{,}80x10^{-1}$	290,00	$2{,}41x10^{-4}$	0,05	$9{,}96x10^{-1}$	289,95	$6{,}03x10^{-7}$	0,00	$2{,}09x10^{-3}$	0,05	$2{,}04x10^{-9}$	0,00	$2{,}97x10^{-6}$	0,00
CHA	$8{,}00x10^{-2}$	40,00	$1{,}91x10^{-1}$	39,90	$3{,}31x10^{-4}$	0,10	$2{,}15x10^{-1}$	39,86	$1{,}92x10^{-3}$	0,05	$2{,}27x10^{-2}$	2,93	$9{,}90x10^{-1}$	36,84
CHOL	$5{,}00x10^{-2}$	25,00	$1{,}15x10^{-1}$	24,05	$3{,}28x10^{-3}$	0,95	$7{,}53x10^{-4}$	0,14	$9{,}96x10^{-1}$	23,91	$8{,}57x10^{-6}$	0,00	$3{,}70x10^{-3}$	0,14
Água	$4{,}00x10^{-2}$	20,00	$9{,}57x10^{-2}$	20,00	$2{,}05x10^{-12}$	0,00	$1{,}08x10^{-2}$	20,00	$1{,}37x10^{-51}$	0,00	$1{,}03x10^{-2}$	1,33	$3{,}16x10^{-9}$	0,00

Tabela III.5: Resultados do perfil de concentrações obtido pelo método rigoroso na sequência 4.

	Coluna 1						Coluna 2				Coluna 3			
	F		**D_1**		**B_1**		**D_2**		**B_2**		**D_3**		**B_3**	
	x_i	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**
Benzeno	$2{,}50x10^{-1}$	125,00	$8{,}39x10^{-1}$	124,80	$5{,}81x10^{-4}$	0,20	$3{,}33x10^{-3}$	0,20	$3{,}96x10^{-11}$	0,00	$5{,}32x10^{-3}$	0,20	$184x10^{-46}$	0,00
Anilina	$5{,}80x10^{-1}$	290,00	$1{,}28x10^{-2}$	1,90	$8{,}20x10^{-1}$	288,10	$1{,}57x10^{-4}$	0,01	$9{,}93x10^{-1}$	288,09	$2{,}43x10^{-7}$	0,00	$4{,}19x10^{-4}$	0,01
CHA	$8{,}00x10^{-2}$	40,00	$1{,}17x10^{-2}$	1,74	$1{,}09x10^{-1}$	38,26	$6{,}21x10^{-1}$	38,03	$7{,}71x10^{-4}$	0,22	$9{,}90x10^{-1}$	37,95	$3{,}62x10^{-3}$	0,08
CHOL	$5{,}00x10^{-2}$	25,00	$2{,}24x10^{-3}$	0,33	$7{,}02x10^{-2}$	24,67	$3{,}75x10^{-1}$	22,99	$5{,}78x10^{-3}$	1,68	$4{,}57x10^{-3}$	0,18	$9{,}96x10^{-1}$	22,81
Água	$4{,}00x10^{-2}$	20,00	$1{,}34x10^{-1}$	20,00	$4{,}76x10^{-9}$	0,00	$2{,}73x10^{-8}$	0,00	$4{,}44x10^{-21}$	0,00	$4{,}36x10^{-8}$	0,00	$2{,}44x10^{-73}$	0,00

Tabela III.6: Resultados do perfil de concentrações obtido pelo método rigoroso na sequência 5.

	Coluna 1						Coluna 2				Coluna 3			
	F		**D_1**		**B_1**		**D_2**		**B_2**		**D_3**		**B_3**	
	x_i	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**	**x_i**	**F_i (kg/h)**
Benzeno	$2{,}50\times10^{-1}$	125,00	$8{,}32\times10^{-1}$	124,84	$4{,}59\times10^{-4}$	0,16	$4{,}37\times10^{-3}$	0,16	$1{,}13\times10^{-30}$	0,00	$0{,}00\times10^{0}$	0,00	$0{,}00\times10^{0}$	0,00
Anilina	$5{,}80\times10^{-1}$	290,00	$9{,}24\times10^{-3}$	1,39	$8{,}25\times10^{-1}$	288,61	$7{,}51\times10^{-4}$	0,03	$9{,}21\times10^{-1}$	288,59	$2{,}96\times10^{-4}$	0,01	$9{,}98\times10^{-1}$	288,58
CHA	$8{,}00\times10^{-2}$	40,00	$2{,}32\times10^{-2}$	3,48	$1{,}04\times10^{-1}$	36,52	$9{,}90\times10^{-1}$	36,43	$2{,}86\times10^{-4}$	0,09	$3{,}72\times10^{-3}$	0,09	$7{,}00\times10^{-8}$	0,00
CHOL	$5{,}00\times10^{-2}$	25,00	$1{,}97\times10^{-3}$	0,30	$7{,}06\times10^{-2}$	24,70	$4{,}91\times10^{-3}$	0,18	$7{,}83\times10^{-2}$	24,52	$9{,}96\times10^{-1}$	23,90	$2{,}14\times10^{-3}$	0,62
Água	$4{,}00\times10^{-2}$	20,00	$1{,}33\times10^{-1}$	20,00	$1{,}20\times10^{-7}$	0,00	$1{,}14\times10^{-6}$	0,00	$1{,}31\times10^{-51}$	0,00	$0{,}00\times10^{0}$	0,00	$0{,}00\times10^{0}$	0,00

Tabela III.7: Resultados obtidos na optimização da coluna 1 da sequência 2.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
25	22	4,50	0,48	183,6	207695	73,2	179624	30,48	53,77	84,25
27	23	3,50	0,44	183,6	175026	73,2	146952	29,17	45,83	75,00
30	25	2,12	0,38	183,6	129865	73,2	101791	26,64	34,85	61,49
35	29	1,00	0,33	183,6	93387	73,2	65314	25,04	25,98	51,02
40	33	0,79	0,32	183,6	86528	73,2	58455	26,75	24,31	51,06
45	38	0,67	0,31	183,6	82610	73,2	54537	28,82	23,36	52,18
50	43	0,62	0,30	183,6	80814	73,2	52742	31,28	22,93	54,21
55	48	0,59	0,30	183,6	79998	73,2	51925	33,27	22,73	56,00

Tabela III.8: Resultados obtidos na optimização da coluna 2 da sequência 2.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
31	5	5,10	0,45	160,8	171572	72,4	170240	32,20	44,99	77,18
35	5	0,80	0,25	160,8	51567	72,4	50235	18,19	15,82	34,01
40	5	0,21	0,21	160,8	35101	72,4	33769	17,00	11,81	28,81
45	8	0,10	0,20	160,8	32031	72,4	30699	17,96	11,07	29,03
50	10	0,08	0,21	160,8	31571	72,4	30238	19,94	10,95	30,89
55	13	0,08	0,21	160,8	31437	72,4	30104	21,70	10,92	32,62
60	17	0,08	0,21	160,8	31386	72,4	30054	23,46	10,91	34,37
65	23	0,08	0,21	160,8	31370	72,4	30037	25,22	10,91	36,12

Tabela III.9: Resultados obtidos na optimização da coluna 3 da sequência 2.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
8	3	0,83	0,20	133,5	28499	69,3	24578	8,09	10,21	18,30
9	3	0,36	0,18	133,5	22120	69,3	18199	7,87	8,66	16,53
10	4	0,21	0,17	133,5	20226	69,3	16305	7,91	8,20	16,11
15	6	0,13	0,17	133,5	19135	69,3	15214	8,70	7,93	16,63
20	10	0,13	0,17	133,5	19084	69,3	15163	9,61	7,92	17,53
25	14	0,13	0,17	133,5	19082	69,3	15161	10,57	7,92	18,49

Tabela III.10: Resultados obtidos na optimização da coluna 1 da sequência 4.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
9	2	0,69	0,29	171,6	69386	69,4	40272	10,90	20,15	31,05
10	3	0,01	0,26	171,4	53332	69,5	24262	10,23	16,24	26,47

Tabela III.11: Resultados obtidos na optimização da coluna 2 da sequência 4.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
40	35	8,00	0,26	183,3	56389	145,5	55203	21,50	16,99	38,49
45	39	7,70	0,23	183,3	44735	145,5	43548	21,14	14,15	35,29
50	43	4,90	0,21	183,3	37374	145,5	36188	21,20	12,37	33,56
55	47	4,08	0,20	183,3	32376	145,5	31189	21,51	11,15	32,66
60	52	4,04	0,20	183,3	32130	145,5	30944	23,11	11,09	34,21
65	56	3,70	0,20	183,3	30012	145,5	28826	24,07	10,58	34,65
70	61	3,60	0,20	183,3	29400	145,5	28213	25,55	10,43	35,97

Tabela III.12: Resultados obtidos na optimização da coluna 3 da sequência 4.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
40	6	5,25	0,17	160,8	21108	133,6	21029	13,91	8,41	22,32
48	8	3,75	0,14	160,8	16061	133,6	15982	13,92	7,18	21,10
55	9	3,15	0,13	160,8	14042	133,6	13963	14,39	6,69	21,08
60	7	2,85	0,13	160,8	13033	133,6	12953	14,87	6,45	21,32
65	8	2,65	0,13	160,8	12360	133,6	12281	15,36	6,28	21,65

Tabela III.13: Resultados obtidos na optimização da coluna 1 da sequência 5.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
6	3	2,20	0,27	157,4	101228	69,6	75179	9,57	27,89	37,46
7	3	0,90	0,26	167,7	73578	69,6	45349	9,53	21,17	30,70
8	3	0,12	0,26	171,7	55928	69,6	26849	9,77	16,88	26,64
9	4	0,05	0,26	171,7	55925	69,6	26849	10,07	16,88	26,95
10	5	0,05	0,26	171,6	54169	69,6	25097	10,28	16,45	26,73

Tabela III.14: Resultados obtidos na optimização da coluna 2 da sequência 5.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
100	13	7,87	0,20	178,8	29374	133,8	28660	37,06	10,42	47,48
95	13	7,94	0,20	178,8	29601	133,8	28885,6	35,15	10,48	45,62
90	13	8,03	0,20	178,8	29892	133,8	29177	33,31	10,55	43,86
85	13	8,14	0,20	178,8	30247	133,8	29532	31,56	10,63	42,19
80	12	8,26	0,20	178,8	30636	133,8	29921	29,87	10,73	40,60
75	12	8,43	0,20	178,8	31184	133,8	30469	28,30	10,86	39,16
70	12	8,64	0,20	178,8	31846	133,8	31131	26,79	11,02	37,81
65	11	8,86	0,21	178,8	32608	133,8	31893	25,32	11,21	36,52
60	11	9,23	0,21	178,8	33769	133,8	33054	24,01	11,49	35,49
55	11	9,65	0,22	178,8	35128	133,8	34413	22,73	11,82	34,55
50	11	10,30	0,22	178,8	37227	133,8	36513	21,64	12,33	33,97
45	10	11,20	0,23	178,8	40137	133,8	39423	20,69	13,04	33,72
40	10	12,80	0,25	178,8	45306	133,8	44591	20,13	14,29	34,43
35	10	15,90	0,27	178,8	55321	133,8	54606	20,26	16,73	36,99
30	9	24,30	0,33	178,8	82463	133,8	81748	22,52	23,33	45,85

Tabela III.15: Resultados obtidos na optimização da coluna 3 da sequência 5.

Número de pratos	Prato de alimentação	Razão de refluxo	Diâmetro da coluna (m)	Temperatura do reebulidor (ºC)	Q_R (W)	Temperatura do condensador (ºC)	Q_C (W)	Custos aquisição (k€/ano)	Custos operação (k€/ano)	Custos totais (k€/ano)
45	42	34,70	0,33	183,7	93386	160,8	92823	30,89	25,98	56,87
50	44	11,05	0,20	183,7	31894	160,8	31331	19,79	11,03	30,82
55	45	8,42	0,18	183,7	25056	160,8	24492	19,30	9,37	28,67
60	45	7,60	0,18	183,7	22924	160,8	22361	19,99	8,85	28,84
65	46	7,40	0,18	183,7	22404	160,8	21840	21,20	8,73	29,93
70	50	7,31	0,17	183,7	22157	160,8	21594	22,54	8,67	31,21

É possível compreender melhor os resultados obtidos e registados, nas Tabelas III.7 à III.15, através da análise dos seguintes gráficos, Figuras III.1 à III.3. Os resultados estão apresentados na forma de gráfico, o que permite visualizar com maior facilidade qual o ponto óptimo para cada coluna de cada sequência. O ponto óptimo, é o ponto onde o conjunto dos custos de aquisição e de operação é mais baixo, ou seja, quando os custos totais são mais baixos.

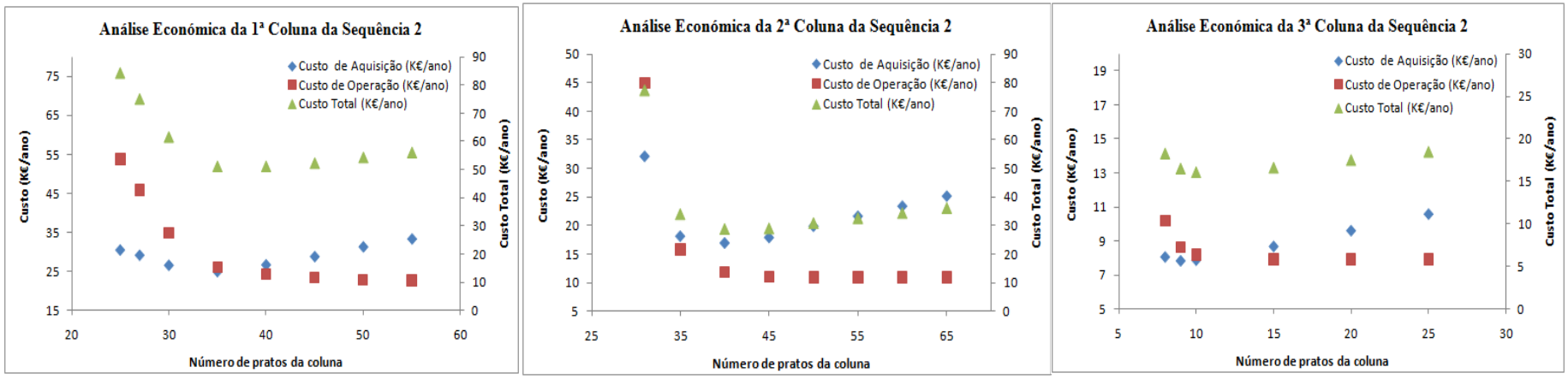

Figura III.1: Representação gráfica dos custos da sequência 2.

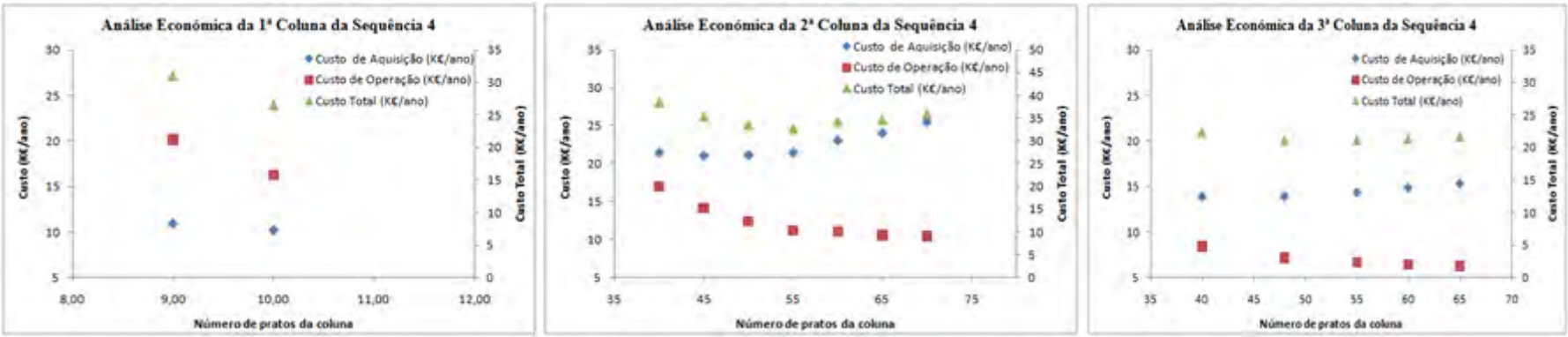

Figura III.2: Representação gráfica dos custos da sequência 4.

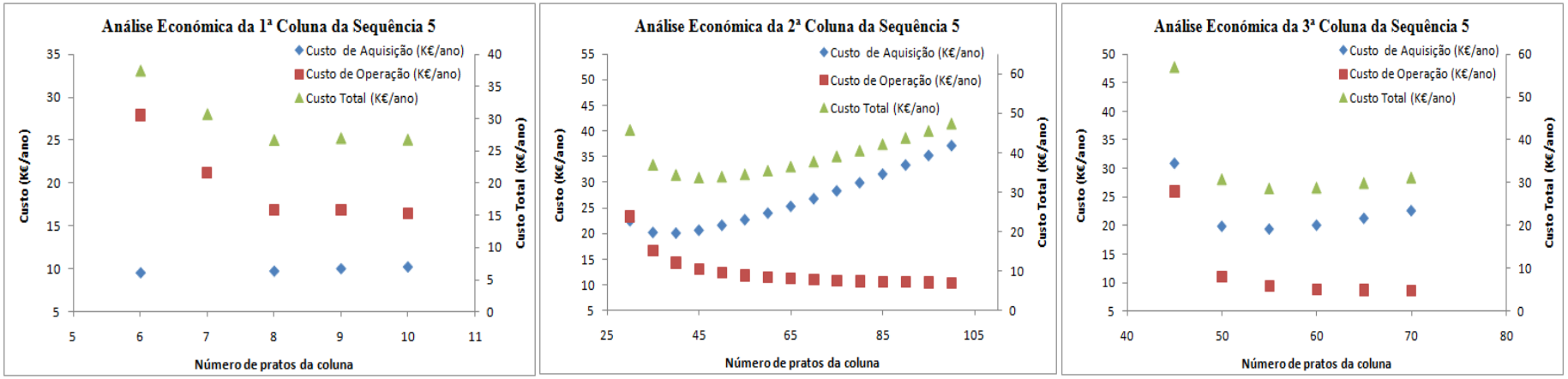

Figura III.3: Representação gráfica dos custos da sequência 5.

Anexo IV – Coeficientes Típicos para o Dimensionamento de Decantadores e Permutadores de Calor

Tabela IV.1: Coeficientes utilizados na determinação dos custos do decantador.[21]

Diâmetro (m)	k_1	k_2	k_3	L_{min} (m)	$L_{máx}$ (m)
0,3	2,9202	0,5056	0,1261	1,0	20
0,5	3,1032	0,5782	0,0632	1,5	25
1,0	3,3592	0,5905	0,1106	2,2	30
1,5	3,4204	0,8141	-0,0046	3,5	36
2,0	3,7599	0,3683	0,1954	4,5	40
2,5	3,6780	0,7120	0,0430	5,5	42
3,0	3,7718	0,7159	0,0470	6,5	50
4,0	4,1551	0,2238	0,2499	8,0	52

Tabela IV.2: Valores típicos do coeficiente global de transferência de calor.[10]

Shell and tube exchangers		
Hot fluid	Cold fluid	U (W/m^2°C)
Heat exchangers		
Water	Water	800–1500
Organic solvents	Organic solvents	100–300
Light oils	Light oils	100–400
Heavy oils	Heavy oils	50–300
Gases	Gases	10–50
Coolers		
Organic solvents	Water	250–750
Light oils	Water	350–900
Heavy oils	Water	60–300
Gases	Water	20–300
Organic solvents	Brine	150–500
.Water	Brine	600–1200
Gases	Brine	15–250
Heaters		
Steam	Water	1500–4000
Steam	Organic solvents	500–1000
Steam	Light oils	300–900
Steam	Heavy oils	60–450
Steam	Gases	30–300
Dowtherm	Heavy oils	50–300
Dowtherm	Gases	20–200
Flue gases	Steam	30–100
Flue	Hydrocarbon vapours	30–100
Condensers		
Aqueous vapours	Water	1000–1500
Organic vapours	Water	700–1000
Organics (some non-condensables)	Water	500–700
Vacuum condensers	Water	200–500
Vaporisers		
Steam	Aqueous solutions	1000–1500
Steam	Light organics	900–1200
Steam	Heavy organics	600–900

Tabela IV.3: Diâmetros dos permutadores de calor.[24]

Nominal pipe size, IPS, in.	OD, in.	Schedule No.	ID, in.	Flow area per pipe, in.²	Surface per lin ft, ft.²/ft. Outside	Surface per lin ft, ft.²/ft. Inside	Weight per lin ft, lb steel
⅛	0.405	40*	0.269	0.058	0.106	0.070	0.25
		80†	0.215	0.036		0.056	0.32
¼	0.540	40*	0.364	0.104	0.141	0.095	0.43
		80†	0.302	0.072		0.079	0.54
⅜	0.675	40*	0.493	0.192	0.177	0.129	0.57
		80†	0.423	0.141		0.111	0.74
½	0.840	40*	0.622	0.304	0.220	0.163	0.85
		80†	0.546	0.235		0.143	1.09
¾	1.05	40*	0.824	0.534	0.275	0.216	1.13
		80†	0.742	0.432		0.194	1.48
1	1.32	40*	1.049	0.864	0.344	0.274	1.68
		80†	0.957	0.718		0.250	2.17
1¼	1.66	40*	1.380	1.50	0.435	0.362	2.28
		80†	1.278	1.28		0.335	3.00
1½	1.90	40*	1.610	2.04	0.498	0.422	2.72
		80†	1.500	1.76		0.393	3.64

Tabela IV.4: Constantes utilizadas na Equação 6.3.[10]

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n_1	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675
Square pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.215	0.156	0.158	0.0402	0.0331
n_1	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

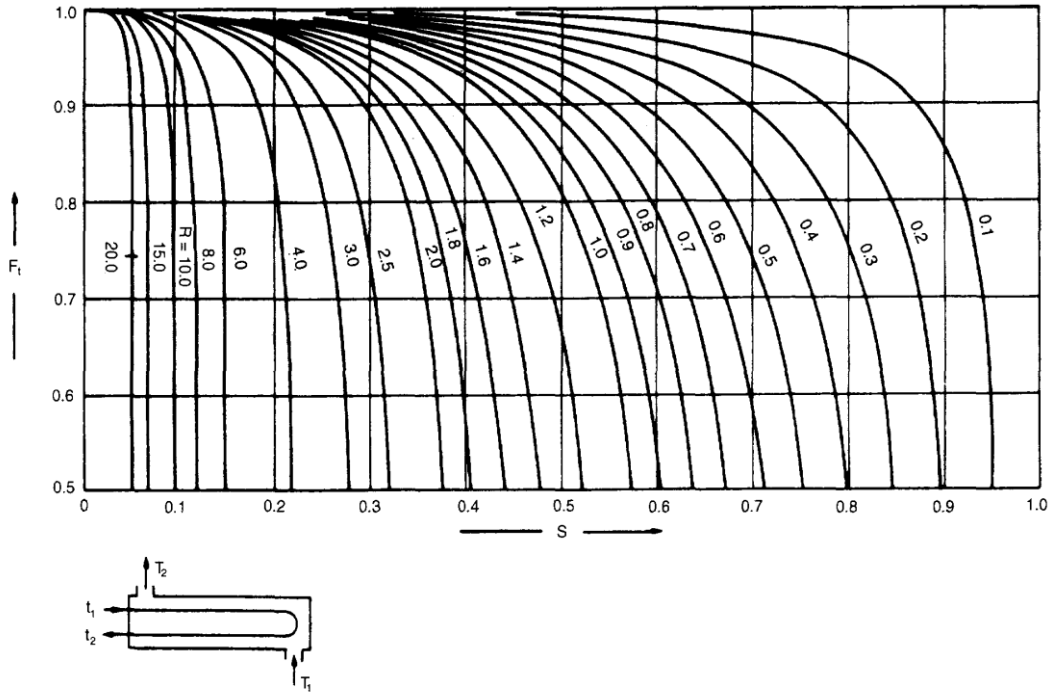

Figura IV.1: Factor de correcção para uma passagem na carcaça e duas ou mais nos tubos.[10]

As equações seguintes permitem a determinarão da média logarítimca corrigida.[10]

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} \qquad \text{Equação IV.1}$$

$$S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)} \qquad \text{Equação IV.2}$$

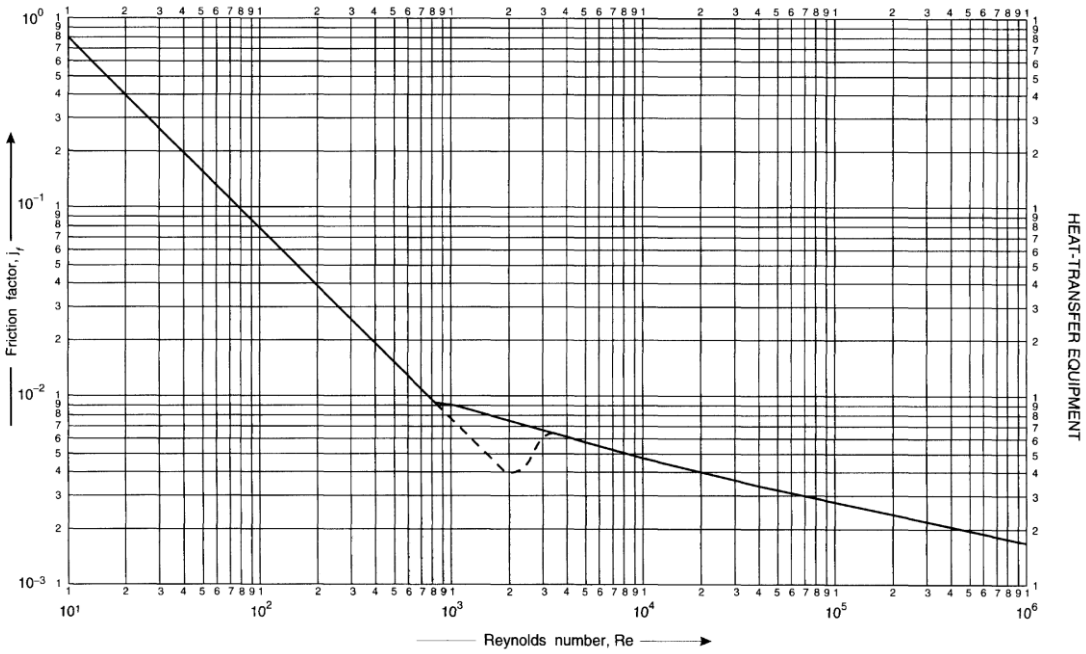

Figura IV.2: Factor de e fricção do lado dos tubos.[10]

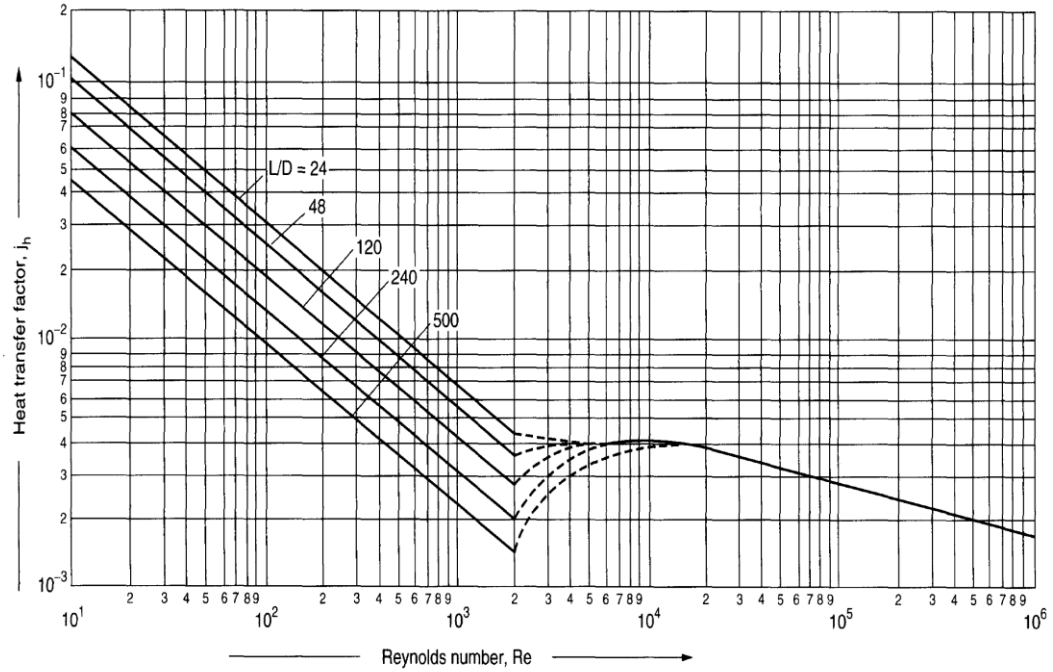

Figura IV.3: Factor de transferência de calor do lado dos tubos.

Anexo V – Data Sheet dos Permutadores de Calor

Tabela V.1: Exemplo de uma *data sheet* para um reebulidor.

	Permutador de calor – *Data Sheet*	***Rev.:1*** ***Data:27.5.2009***	
1	Designação	Reebulidor da coluna 1	
2	Tipo	Termosifão	
3	Calor trocado	135 179 kJ/h	
4	Área de transferência de calor	1,66 m^2	
		Lado dos tubos	**Lado da carcaça**
5	Fluido	Mistura líquida	Vapor saturado
6	Temperatura de operação à entrada | à saída	171,4 ºC | 171,4 ºC	224,6ºC | 224,6ºC
6a	Temperatura média de operação	171,4 ºC	224,6 ºC
6b	Temperatura máxima de operação		
7	Pressão de operação à entrada | à saída	1 bar | 1 bar	24 bar | 24 bar
8	Caudal mássico	180 kg/h	100 kg/h
9	Calor latente de vaporização		
10	Massa específica**	861 kg/m^3	-
11	Capacidade calorífica**	1,84 kJ/(kg.ºC)	-
12	Condutividade térmica**	0,16 W/(ºC.m)	-
13	Viscosidade**	0,0004 Pa.s	-
	Número de chicanes | corte		
14	Número de passagens	1	1
15	*Pitch*	Δ; 1.25	
16	Coeficiente de sujidade	5 000 W/(m^2.ºC)	11 111 W/(m^2.ºC)
17	Regime de operação	Turbulento	
18	Perda de carga	0, 10bar	
19	Coeficiente global de transferência de calor, limpo		478 W/(m^2.ºC)
20	Coeficiente global de sujidade		
21	Média logaritmica das temperaturas (corrigida)		53 ºC
22	Área transferência de calor requerida		2,93 m^2
23	Número de tubos		
24	Diâmetro nominal dos tubos		161 mm
25	Diâmetro externo dos tubos | espessura		33,5 mm | 6,9 mm
26	Comprimento linear dos tubos		3,7 m
27	Diâmetro interno da carcaça		370 mm
28	Espessura da carcaça		10 mm
29	Diâmetro externo da carcaça		387 mm
** à temperatura média de operação			

Tabela V.2: Exemplo de uma *data sheet* para um condensador.

	Permutador de calor – *Data Sheet*	***Rev.:1*** ***Data:27.5.2009***	
1	Designação	condensador da coluna 1	
2	Tipo	Carcaça e tubos	
3	Calor trocado	121 897 kJ/h	
4	Área de transferência de calor	1,8 m^2	
		Lado dos tubos	**Lado da carcaça**
5	Fluido	Mistura líquida	Vapor saturado
6	Temperatura de operação à entrada | à saída	25,0 ºC | 27,87 ºC	80,14ºC | 69,46ºC
6a	Temperatura média de operação	26,43 ºC	74,8 ºC
6b	Temperatura máxima de operação		
7	Pressão de operação à entrada | à saída		
8	Caudal mássico	9 980 kg/h	151 kg/h
9	Calor latente de vaporização		
10	Massa específica**	998,21 kg/m^3	671,68 kg/m^3
11	Capacidade calorífica**	Da água kJ/(kg.ºC)	
12	Condutividade térmica**	0,607W/(ºC.m)	0,28 1W/(ºC.m)
13	Viscosidade**	0,000975 Pa.s	0,000480 Pa.s
	Número de chicanes | corte		
14	Número de passagens	1	1
15	*Pitch*	Δ; 1.25	
16	Coeficiente de sujidade	3 333 W/(m^2.ºC)	66 667 W/(m^2.ºC)
17	Regime de operação	Turbulento	
18	Perda de carga		
19	Coeficiente global de transferência de calor, limpo		669 W/(m^2.ºC)
20	Coeficiente global de sujidade		3175 W/(m^2.ºC)
21	Média logaritmica das temperaturas (corrigida)		48,1 ºC
22	Área transferência de calor requerida		1,05 m^2
23	Número de tubos		20
24	Diâmetro nominal dos tubos		180 mm
25	Diâmetro externo dos tubos | espessura		33,5 mm | 6,9 mm
26	Comprimento linear dos tubos		0,85 m
27	Diâmetro interno da carcaça		254,5 mm
28	Espessura da carcaça		9,27 mm
29	Diâmetro externo da carcaça		273,0 mm
** à temperatura média de operação			